

地殻複雑媒体における物質移動評価のための非整数階微分を利用した数値解析モデル開発に関する研究

著者	千葉 隆一
学位授与機関	Tohoku University
URL	http://hdl.handle.net/10097/48275

地殻複雑媒体における物質移動評価のための
非整数階微分を利用した数値解析モデル開発に関
する研究

東北大学大学院環境科学研究科

環境科学専攻 橋田研究室

A6GD1206

千葉 隆一

平成 21 年度

(平成 22 年 1 月 20 日提出)

目次

第1章 序論	1
参考文献	8
第2章 数理モデルの提示と数値計算法の開発	13
2.1 緒言	13
2.2 物質輸送を記述する数理モデルの提示	13
2.2.1 一般的な物質輸送モデル	13
2.2.2 物質移動モデル 1: 非整数階微分を利用した拡散モデル	14
2.2.3 物質移動モデル 2: 非整数階微分を利用した移流拡散モデル	16
2.3 物質移動モデルの数値解法	18
2.3.1 非整数階微分を含む項の離散化	18
2.3.2 拡散方程式の数値計算	22
2.3.3 移流拡散方程式の数値計算	25
2.3.4 非整数階微分の定義による計算結果の相違	29
2.4 結言	31
参考文献	32
第3章 非整数階微分の階数と物質輸送の関係	33
3.1 緒言	33
3.2 計算条件	33
3.3 時間微分項に存在する微分係数の影響	34

3.4	空間微分項に存在する微分係数の影響	38
3.5	微分係数以外の変数による影響	39
3.5.1	時間微分項同士の影響を表す変数	39
3.5.2	拡散挙動を制御する無次元数	43
3.6	結言	45
	参考文献	46
第4章	パラメータ決定法の考案	47
4.1	緒言	47
4.2	変数決定法の概要	47
4.3	トレーサーの空間分布を利用した変数の推定	49
4.3.1	数理モデルと計算条件	49
4.3.2	2変数での解析	52
4.3.3	3変数での解析	55
4.4	トレーサー応答曲線から行う変数の決定	63
4.4.1	数理モデルと計算条件	63
4.4.2	2変数での解析	63
4.4.3	3変数での解析	68
4.5	トレーサー観測値を使用した変数決定法の検証	72
4.6	結言	74
	参考文献	75
第5章	長期温度変化挙動推定への応用	76
5.1	緒言	76
5.2	トレーサー応答を利用した温度変化の推定	77
5.2.1	温度変化推定モデル	77

5.2.2	トレーサー応答による温度変化推定結果	78
5.3	結言	85
	参考文献	86
第 6 章	結論	87
付 録 A	流動パラメータと観測される物質移動	i
	謝辞	xvii
	公表論文リスト	xix

第1章 序論

小規模島しょ国が直面している国土の水没問題や、アフリカ諸国の干ばつなど様々な問題の要因として世界的な関心事となっている地球温暖化問題への取り組みとして、温室効果ガス排出量の低減を目的とした低炭素社会への移行が提唱されている [1]。IPCC(気候変動に関する政府間パネル)の第4次評価報告書では、最良のシナリオとなった場合でも、過去の排出分が作用することで今世紀末の気温上昇は避けられないとの予測がなされている [2]。そのため、温室効果ガスの削減に加えて複数の対策を行う必要となる。これにともなって、我が国では温室効果ガスを 2020 年までに 1990 年比で 25%削減という中期目標を宣言し、各国に対して実効性のある国際的枠組の構築を求めている [3]。また、資源に乏しく化石燃料の大半を輸入に依存している我が国では、地球温暖化対策以外にもアジアを中心としたエネルギー需要の急増にともなう燃料価格の高騰や、資源産出国の資源供給力低下を見据えたエネルギー戦略上重要な意味を有している。例えば、我が国では電力の安定供給を目的として電源のベストミックスが採られている [4]。これは、特定の発電方法のみに依存するのではなく、火力・原子力・水力など複数の発電方法をその特性を利用した形で混在させる手法である。例えば、安定して発電が可能な原子力はベース電源として運用し、燃料の投入量で柔軟に発電量の制御が可能な火力発電は高需要期の予備電源として運用させるなど、その特性を生かした運用方法が取られている。

我が国のベース電源として年間発電量の約 30%を占める原子力発電は、温室効果ガス排出量の低さから、温室効果ガス削減目標達成に必要な発電方法として期待されている。しかしながら、現在使用済み燃料から排出される高レベル放射性廃棄物の処分方法が懸念されている。燃料となる ^{235}U の核分裂により生じる核分裂生成物やアクチニド元素の中

には、数千年から数万年の半減期を有している元素が存在している [5]。そのため、その処分方法・処分地点の選定には慎重を期せねばならない。高レベル放射性廃棄物の処分方法としてはこれまでに大深度地下への埋設、宇宙への投棄、深海あるいは南極の氷床処分など複数の方法が提案されている [6]。排出者が廃棄物を管理すること、超長期にわたって安定した管理が行えることなどから、現在では地層処分が多くの国で推進されている。地層処分では、金属製の容器（オーバーパック）に封入されたガラス固化体となった廃棄物を、地下数百メートルの安定した岩盤に埋設する。オーバーパックの周囲はベントナイトで覆われており [6]、これらを人工バリアと称している。我が国は中間処分施設の建設や地層処分技術の研究が行われている [7] ものの、最終処分場の選定には至っていない。

また、純国産の持続可能なエネルギー源として知られている地熱を利用した発電方法 [8] もまたベース電源として優秀な潜在能力を有している。安定した熱源であるため、国際的にも注目されており [9]、フィリピンでは総発電量の約 10% を地熱発電が占めている。環太平洋造山帯に属し、海洋プレートと大陸プレートの境目に位置する我が国は典型的な火山国である。そのため、有望な地熱資源に恵まれてはいるものの、技術的・地勢的・政治的制約のために十数年前から発電量は頭打ちとなっている。そのため、地熱発電の普及を目的とした提言もなされている [10, 11]。現在、多くの地熱発電所では、環境負荷の低減と地熱貯留層の涵養を目的として、発電に使用した熱水を地下に還元している。この還元熱水は発電前よりも温度が低いため、慎重に還元位置を選定した上で還元が行われている [12–15]。

地熱貯留層への適切な還元井を配置する場合、温度低下を防ぐために還元した熱水が貯留層に戻らないこととされている。また、放射性廃棄物の地層処分候補地には、埋設した廃棄物が長期間安定して保持される地域望ましい。これら地下での熱水移動や、放射性核種の拡散などを直接測定することは困難である。そのため、トレーサーを投入してその動きから当該地域の流動を推定するトレーサー試験が活用されている [16]。地下に投入したトレーサーの応答は移動現象論 [17] に基づいた数学モデルで解析することで流れの速

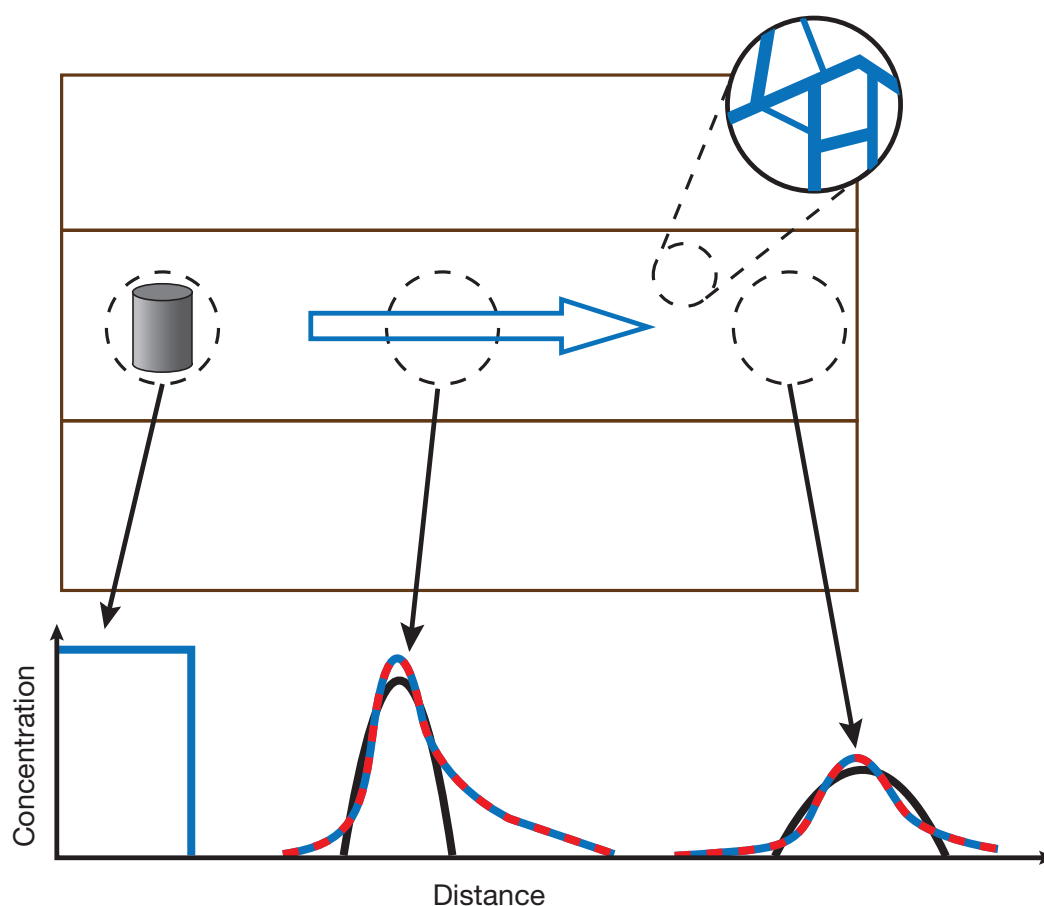


Fig. 1.1: 物質輸送の概念と数学モデルによる推定例

度や範囲など様々な情報を引き出すことが可能である [18–20]. また、数学モデルは観測対象や地下の状態によって様々なモデルが提案されており [21, 22], 種々の目的で様々なトレーサー試験が行われている [23–30].

しかしながら、多くのき裂が不均一に分布している複雑な媒体を対象とした場合、Fig.1.1のような予測よりも早いトレーサーの到達や、長いテーリングといった現象を適切に表現することが困難であることが指摘されていた [31, 32]. そのような現象に対処するために、数学モデルは空間的な不均質さや物質の吸着などを考慮したものが提案されている [33]. しかしながら存在しうる全ての現象をモデルに取り込むことは困難である。また、考慮する現象が増加するために数学モデルそのものが煩雑化してしまう欠点が存在する。本研究

ではこれら数学モデルに対して、より少ない変数のみで現象を表すことの可能な物質輸送数理モデルを提案する。この数学モデルは非整数階微分を利用した偏微分方程式で記述される。この非整数階微分に基づいた数理モデルは実際の現象をよく再現できていることが報告されている [34, 35]。しかしながら、この数理モデルに含まれる変数は特定の物性値や地質情報そのものではない。そのため、その物理的意義の定量的な評価が求められている。

非整数階微分とは微分係数が整数以外にまで拡張されたものである [36]。この概念は整数階微分と同様に古くから存在し、17世紀のライプニッツによる書簡までさかのぼることができる。そして、現在では二分の一階微分などは流体力学や粘弾性力学など工学分野 [37] における数学モデルには不可欠なものとなっている。経済学分野でも非整数階微分を利用した数学モデルが利用されている [38]。

非整数階微分は、これまでに複数の研究者らによってさまざまな定義がなされてきた [39–41]。その中では次の式 (1.1) に示す Riemann-Liouville の定義と呼ばれるものが一般的である [42, 43]。

$${}^{R-L}D_x^\alpha f(x) = \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \frac{\partial^n}{\partial x^n} \int_a^x \frac{f(\xi)}{(x-\xi)^{\alpha+1-n}} d\xi, \quad (n-1 < \alpha < 1). \quad (1.1)$$

また、式 (1.1) による定義で取り扱うには不適切であった初期値問題に対して、Caputo による次の定義が提案されている [44, 45]。本論文では、Caputo によって定義された非整数階微分を使用している。

$${}_a^C D_x^\alpha f(x) = \frac{1}{\Gamma(\alpha-n)} \int_a^x \frac{f^{(n)}(\xi)}{(x-\xi)^{\alpha+1-n}} d\xi, \quad (n-1 < \alpha < 1). \quad (1.2)$$

関数に非整数次階の微分を行った例を以下に示す。Fig.1.2 は関数 $f(x) = x^2$ を非整数階次となる微分係数 α で微分した結果を図示したものである。Fig.1.2(a), (b) はそれぞれ関数の 0 階微分から 1 階微分と 1 階微分から 2 階微分の結果である。これから確認できるように、非整数階次となる微分結果は前後に存在する整数階微分結果の間を結ぶように連続して存在していることがわかる。一般に、関数の一階微分は変化量を示し、二階微分は変

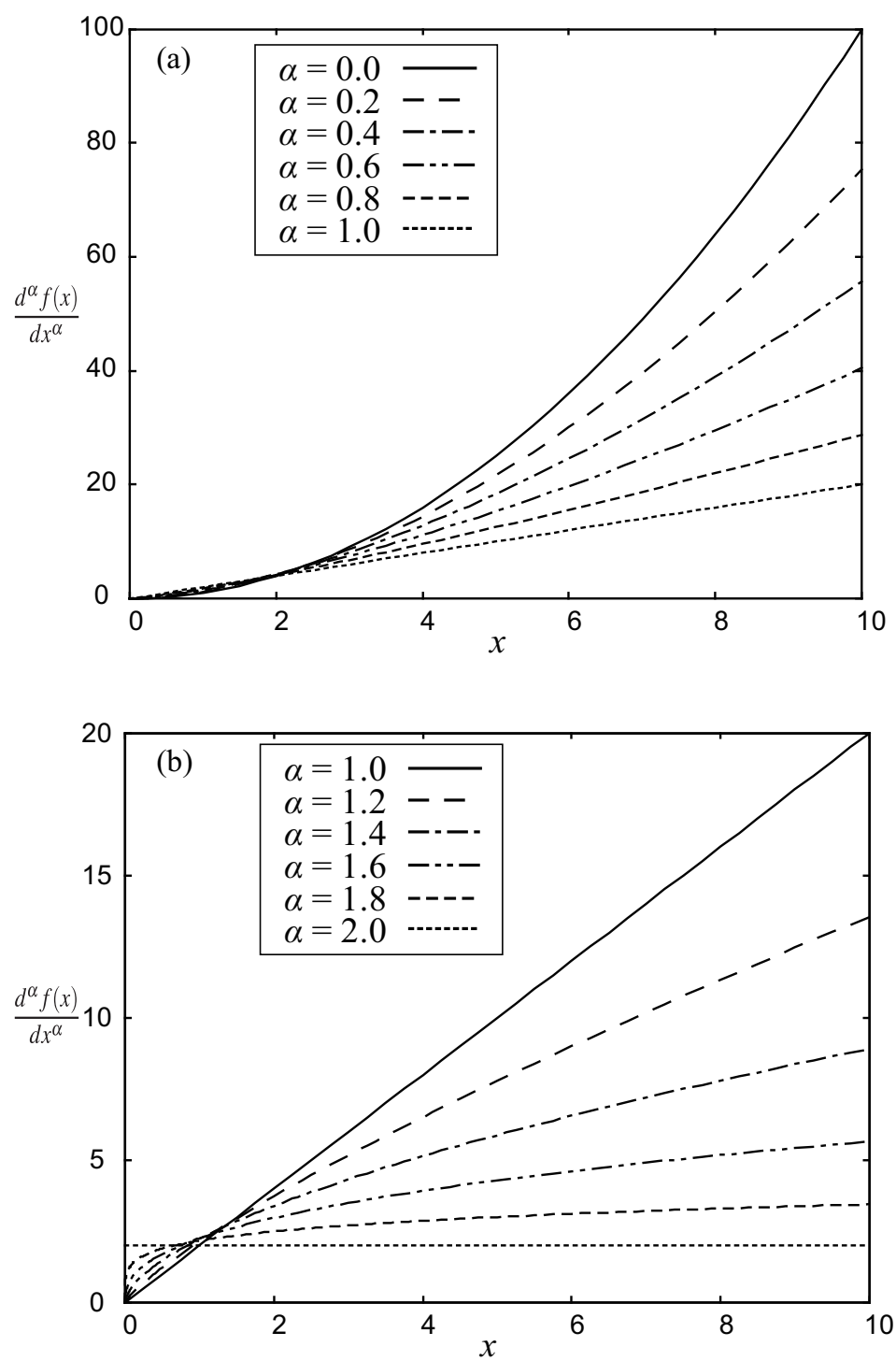


Fig. 1.2: $f(x) = x^2$ の α 階微分 : (a) $\alpha = 0, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1.0$, (b) $\alpha = 1.0, 1.2, 1.4, 1.6, 1.8, 2.0$.

曲点の有無を示すことが知られている。また、物体の運動を考えた場合、位置の一階微分は速度、二階微分は加速度となる。このように、整数階微分は実際の現象と結びつけて考えることである程度その概念を把握することが可能である。しかしながら、非整数階微分は微分係数の範囲が拡張されていること、身近に関連付け易い現象等も少ないことからその概念を把握することは難しい。

本研究では、この非整数階微分を利用した物質輸送数理モデルの開発を軸として、複雑な地殻媒体を対象とした物質輸送挙動の推定手法構築を目的とする。本論文の構成は以下の通りである。Fig.1.3は各章の関連を示す。第1章は序論である。第2章では複雑な地殻媒体を対象とした物質輸送数理モデルとして非整数階微分を含んだ移流拡散モデルを提示する。また、その数値計算方法を開発する。第3章では数理モデルに含まれる微分係数をはじめとする変数が物質輸送挙動に及ぼす影響を変数ごとに検討する。第4章では、数理モデルに含まれる複数の未決定変数の合理的な推定手法として、最適設計問題を応用した変数決定手法を提案する。第5章では4章までに提示した数理モデルと変数決定法を利用した長期間の物質輸送と温度変化推定法の内容を提示する。第6章は結論である。

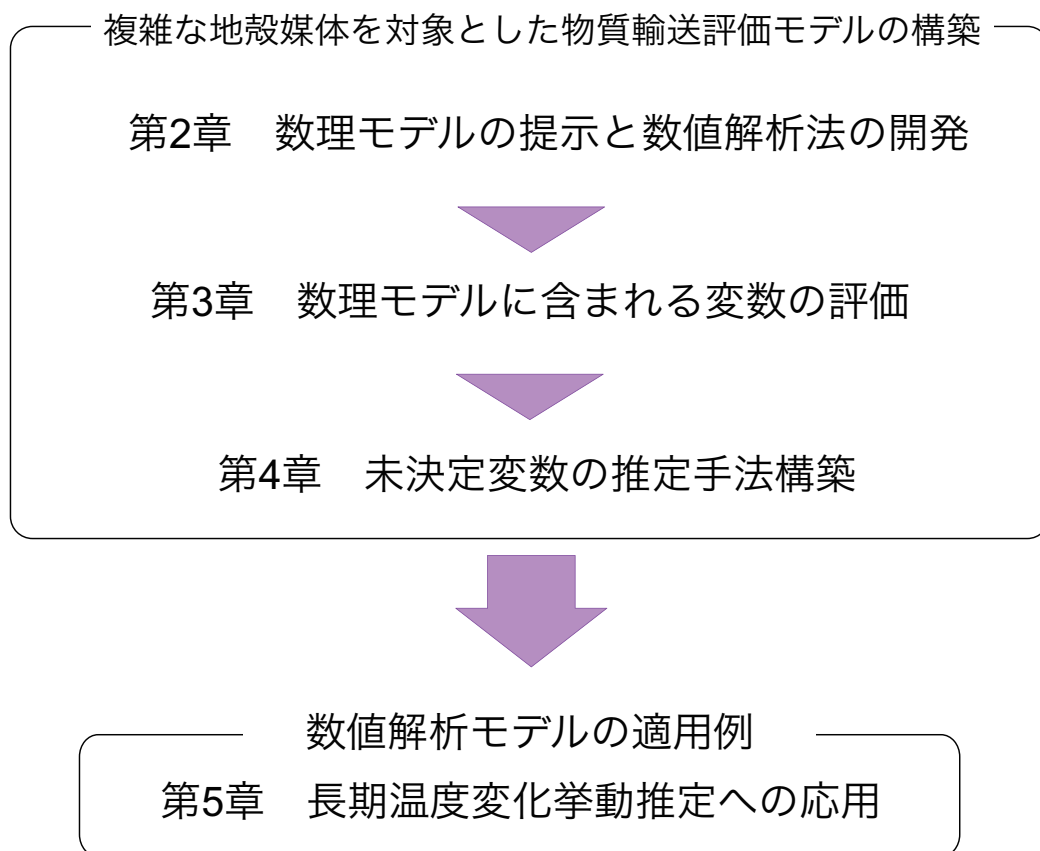


Fig. 1.3: 論文の構成

参考文献

- [1] 環境省. 平成 21 年版 環境白書, 2009.
- [2] IPCC. Climate change 2007 synthesis report, 2007.
- [3] 外務省. 国連気候変動首脳会合における鳩山総理大臣演説.
- [4] 電気事業連合会. 電気事業の現状 2009, 2009.
- [5] D. G. ブルッキンス. 放射性廃棄物処分の基礎 < 地球化学的アプローチ >. 現代工学社, 1987.
- [6] 原子力発電環境整備機構 (NUMO). 地層処分 その安全性, 2003.
- [7] 核燃料サイクル開発機構. わが国における高レベル放射性廃棄物地層処分の技術的信頼性: 地層処分研究開発第 2 次取りまとめ, 1999.
- [8] Mary H. Dickson and Mario Fanelli. 地熱エネルギー入門. IGA, 第 2 版, 2008.
- [9] Tony Batchelor. Geothermal energy: a major renewable energy source. *Proceedings of ICE*, Vol. 158, pp. 40–44, November 2005.
- [10] 日本地熱学会. 我が国の地熱エネルギー利用に関する提言, 10 月 2008.
- [11] 日本地熱学会. 我が国の再生可能エネルギー利用に関する緊急提言-効果的な固定価格買取制度 (FIT) の導入を期待する-, 10 月 2009.
- [12] G. Bödvarsson. Thermal problems in the siting of reinjection wells. *Geothermics*, Vol. 1, No. 2, pp. 63–66, 1972.
- [13] Gudmundur S. Bödvarsson and Chin Fu Tsang. Injection and thermal breakthrough in fractured geothermal reservoirs. *Journal of Geophysical Research*, Vol. 87, No. B2, pp. 1031–1048, February 1982.

- [14] R.N. Horne. Reservoir engineering aspects of reinjection. *Geothermics*, Vol. 14, No. 2/3, pp. 449–457, 1985.
- [15] Gudni Axelsson, Olafur G. Flovenz, Steinunn Hauksdottir, Arnar Hjartarson, and Jiurong Liu. Analysis of tracer test data, and injection-induced cooling, in the Laugaland geothermal field, N-Iceland. *Geothermics*, Vol. 30, pp. 697–725, 2001.
- [16] 千田 侑, 新堀 雄一. 地熱貯留層におけるトレーサー応答解析. 地熱エネルギー, Vol. 11, No. 2, pp. 146–157, April 1986.
- [17] John David Logan. *Transport Modeling in Hydrogeochemical Systems*, Vol. 15 of *Interdisciplinary Applied Mathematics*. Springer-Verlag, New York, 2001.
- [18] 茂野 博. 人工トレーサーを利用した熱水系の化学的調査・評価方法 (1). 地質ニュース, Vol. 411, pp. 22–34, 11 月 1988.
- [19] 茂野 博. 人工トレーサーを利用した熱水系の化学的調査・評価方法 (2). 地質ニュース, Vol. 412, pp. 44–52, 12 月 1988.
- [20] 茂野 博. 人工トレーサーを利用した熱水系の化学的調査・評価方法 (3). 地質ニュース, Vol. 413, pp. 46–59, 1 月 1989.
- [21] Y. Niibori, H. Ogura, and T. Chida. Identification of geothermal reservoir structure analyzing tracer responses using the two-fractured-layer model. *Geothermics*, Vol. 24, No. 1, pp. 49–60, 1995.
- [22] Karsten Pruess. Numerical simulation of 'multiphase tracer transport in fractured geothermal reservoirs. *Geothermics*, Vol. 31, pp. 475–499, 2002.
- [23] W. J. McCabe, B. J. Barry, and M. R. Manning. Radioactive tracers in geothermal underground water flow studies. *Geothermics*, Vol. 12, No. 2/3, pp. 83–110, 1983.

- [24] C. V. Chrysikopoulos. Artificial tracers for geothermal reservoir studies. *Environmental Geology*, Vol. 22, pp. 60–70, 1993.
- [25] E. Hoehn, J. Eikenberg, T. Fierz, W. Drost, and E. Reichlmayr. The grimsel migration experiment: field injection-withdrawal experiments in fractured rock with sorbing tracers. *Journal of Contaminant Hydrology*, Vol. 34, pp. 85–106, 1998.
- [26] Michael C. Adams, Joseph J. Beall, Steven L. Eneedy, Paul N. Hirtz, Phaedra Kilbourn, Brian A. Koenig, Russell Kunzman, and J.L. Bill Smith. Hydrofluorocarbons as geothermal vapor-phase tracers. *Geothermics*, Vol. 30, pp. 747–755, 2001.
- [27] L. Burbery, G. Cassiani, G. Andreotti, T. Ricchiuto, and K. T. Semple. Single-well reactive tracer test and stable isotope analysis for determination of microbial activity in a fast hydrocarbon-contaminated aquifer. *Environmental Pollution*, Vol. 129, pp. 321–330, 2004.
- [28] C. Danquigny, P. Ackerer, and J.P. Carlier. Laboratory tracer tests on three-dimensional reconstructed heterogeneous porous media. *Journal of Hydrology*, Vol. 294, pp. 196–212, 2004.
- [29] Robert Anders and C.V. Chrysikopoulos. Virus fate and transport during artificial recharge with recycled water. *Water Resources Research*, Vol. 41, No. 10, 2005.
- [30] Karsten Pruess, Ton van Heel, and Chao Shan. Tracer testing for estimating heat transfer area in fractured reservoirs. In *Proceedings World Geothermal Congress 2005*, Antalya, Turkey, April 2005.
- [31] Terry J. Day. Longitudinal dispersion in natural channels. *Water Resources Research*, Vol. 11, No. 6, pp. 909–918, December 1975.

- [32] Arturo A. Keller, Paul V. Roberts, and Peter K. Kitanidis. Prediction of single phase transport parameters in a variable aperture fracture. *Geophysical Research Letters*, Vol. 22, No. 11, pp. 1425–1428, June 1995.
- [33] Roko Andričević and Vladimir Cvetković. Evaluation of risk from contaminants migrating by groundwater. *Water Resources Research*, Vol. 32, No. 3, pp. 611–621, March 1996.
- [34] David A. Benson, Stephen W. Wheatcraft, and Mark M. Meerschaert. Application of a fractional advection-dispersion equation. *Water Resources Research*, Vol. 36, No. 6, pp. 1403–1412, June 2000.
- [35] Rina Schumer, David A. Benson, Mark M. Meerschaert, and Boris Baeumer. Multiscaling fractional advection-dispersion equations and their solutions. *Water Resources Research*, Vol. 39, No. 1, p. WR001229, 2003.
- [36] 杉本信正. 非整数階微分・積分とその応用. *ながれ*, Vol. 4, pp. 110–120, 1985.
- [37] Om Prakash Agrawal. Application of fractional derivatives in thermal analysis of disk brakes. *Nonlinear Dynamics*, Vol. 38, pp. 191–206, 2004.
- [38] E. Scalas, R. Gorenflo, and F. Mainardi. Fractional calculus and continuous-time finance. *Physica A*, Vol. 284, pp. 376–384, 2000.
- [39] A. K. Grünwald. Ueber 'begrenzte' derivationen und deren anwendung. *Zeitschrift für Mathematik und Physik*, Vol. 12, pp. 441–480, 1867.
- [40] A. V. Letnikov. Treatments related to the theory of integrals of the form $\int_{\alpha}^x (x - u)^{p-1} f(u) du$. *Mat. Sb.*, Vol. 7, pp. 5–205, 1872.
- [41] Igor Podlubny. Geometric and physical interpretation of fractional integration and fractional differentiation. *Fractional Calculus & Applied Analysis*, Vol. 5, No. 4, pp. 367–386, 2002.

- [42] S. G. Samko, A. A. Kilbas, and O. I. Marichev. *Fractional Integrals and Derivatives: Theory and Applications*. Gordon and Breach, London, 1993.
- [43] Joakim Munkhammar. Riemann-Liouville Fractional Derivatives and the Taylor-Riemann Series. U.U.D.M. Project Report 2004, Department of Mathematics, Uppsala University, July 2004.
- [44] Michele Caputo. Linear Models of Dissipation whose Q is almost Frequency Independent-II. *Geophysical Journal of the Royal Astronomical Society*, Vol. 13, pp. 529–539, 1967.
- [45] M. Caputo and F. Mainardi. Liner models of dissipation in anelastic solids. *Rivista del Nuovo Cimento*, Vol. 1, No. 2, pp. 161–198, April 1971.

第2章 数理モデルの提示と数値計算法の開発

2.1 緒言

複雑な地殻媒体における Fick 則のみで表現できない物質輸送現象は、非整数階微分を含んだ数理モデルを利用することで、実験室およびフィールドスケール双方で実現象を精度良く再現可能であることが報告されている [1, 2]。しかしながら、報告されている事例の多くは方程式を解析的に解いたものが多い。そのため、解析可能な事象は比較的パラメータの少ない単純なものに限られている。そこで、本章ではこの物質輸送数理モデルを提示するとともに、数理モデルの運用を柔軟なものとするための数値計算プログラムを開発する。また、本研究では同一の式を数学的に解いた Fomin ら [3, 4] の解析結果と適宜比較を行うことで、作成したプログラムの有効性・妥当性を随時判断していく。

2.2 物質輸送を記述する数理モデルの提示

2.2.1 一般的な物質輸送モデル

物質移動が定常拡散状態となる場合、Fick の第 1 法則は流束を $J[ML^{-2}T]$ 、拡散係数を $d[L^2T^{-1}]$ 、物質の濃度を $c[ML^{-3}]$ として次のように表現される。

$$J = -d \frac{\partial c}{\partial x} \quad (2.1)$$

Fick の第 1 法則から、式 (2.2) の拡散方程式が導出できる。時間経過による濃度変化が発生する現象を記したもの（非定常拡散）であり、Fick の第 2 法則と呼ばれる。

$$\frac{\partial c}{\partial t} = d \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \quad (2.2)$$

同様に、速度 v を有する流れによる物質移動も考慮した移流拡散方程式は次のように導出できる。

$$\frac{\partial c}{\partial t} = d \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - v \frac{\partial c}{\partial x} \quad (2.3)$$

2.2.2 物質移動モデル 1: 非整数階微分を利用した拡散モデル

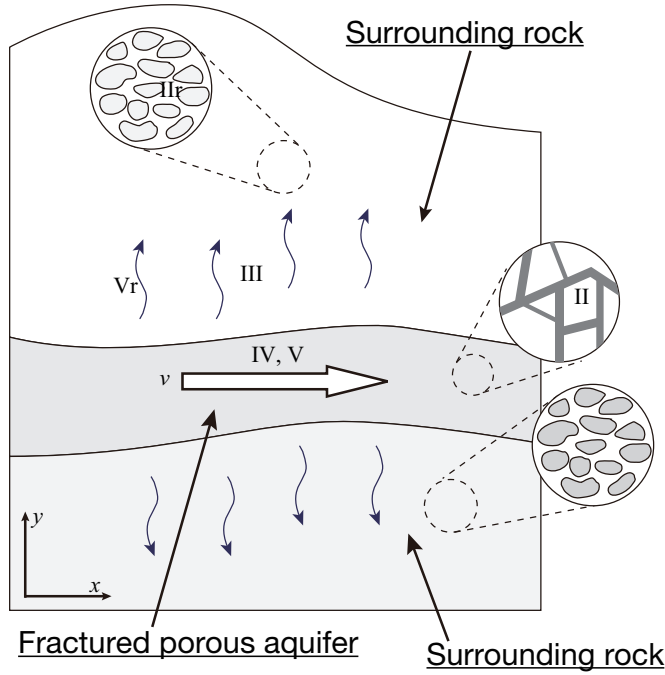
本研究で想定している複雑な地殻媒体の概念を Fig.2.1 に示す。これは、大きさの異なる多数のき裂が不均一に分布し、帯水層には流速 v を持つ流れが存在している帯水層と、その周辺に存在している浸透率の低い岩体から構成されている。帯水層の流れ方向に x 軸、流れに垂直な方向に y 軸を設定し、帯水層・周辺岩体それぞれについて物質輸送を考慮した。

本節では、Fig.2.1 では帯水層の周囲に存在する岩体での物質輸送を考える。岩体中では、拡散によってのみ物質が移動するものとする。また、岩体中では x 方向への物質輸送は y 方向への移動に比べて無視できるほど小さいとして y 方向のみの一次元モデルと仮定した。トレーサー濃度を c_1 、流束を J をした場合、岩体中への一次元拡散方程式は次式で表すことができる。

$$\frac{\partial c_1}{\partial \tau} = - \frac{\partial}{\partial y} (J) \quad (2.4)$$

この流束 J は、Caputo の定義による非整数階微分を利用すると次のように表現される [5]。

$$J = -d_1 D_\tau^{1-\nu} \left(\frac{\partial^\lambda c_1}{\partial y^\lambda} \right). \quad (2.5)$$



Fractured porous aquifer

$$\frac{\partial C}{\partial t} + b \frac{\partial^{\gamma} C}{\partial t^{\gamma}} + \frac{\partial^{\beta} C}{\partial t^{\beta}} = - \frac{\partial C}{\partial X} + \frac{1}{Pe} \frac{\partial}{\partial X} \left(\frac{\partial^{\alpha} C}{\partial X^{\alpha}} \right)$$

I II III IV V

I: 蓄積項

II: 帯水層内微小領域との相互作用を反映

III: 周辺岩体への拡散

IV: 移流

V: 流れ方向への拡散

Surrounding rock

$$\frac{\partial^{\nu} C_1}{\partial t^{\nu}} = \frac{\partial}{\partial Y} \left(\frac{\partial^{\lambda} C_1}{\partial Y^{\lambda}} \right)$$

IIr Vr

IIr: 岩体内部への拡散

Vr: y 方向への拡散

Fig. 2.1: 想定した地殻複雑媒体

d_1 は有効拡散係数, D_{τ} は時間 τ についての微分演算子である. 式 (2.5) に含まれている非整数階微分を Caputo の定義に従った表記で書き下すと次式となる.

$$D^{\lambda} c_1 = \frac{\partial^{\lambda} c_1}{\partial y^{\lambda}} = \int_0^y \frac{(y-\xi)^{-\lambda}}{\Gamma(1-\lambda)} \frac{\partial c_1}{\partial \xi} d\xi, \quad (2.6)$$

$$D_{\tau}^{\nu} c_1 = \frac{\partial^{\nu} c_1}{\partial \tau^{\nu}} = \int_0^{\tau} \frac{(\tau-\xi)^{-\nu}}{\Gamma(1-\nu)} \frac{\partial c_1}{\partial \xi} d\xi, \quad (2.7)$$

この式 (2.4) に式 (2.5) を代入し, 両辺に非整数階積分を行うと次式となる [5].

$$\frac{\partial c_1}{\partial \tau} = - \frac{\partial}{\partial y} \left(d_1 D_{\tau}^{\nu} \left(\frac{\partial^{\lambda} c_1}{\partial y^{\lambda}} \right) \right). \quad (2.8)$$

$$\frac{\partial^{\nu} c_1}{\partial \tau^{\nu}} = \frac{\partial}{\partial y} \left(d_1 \frac{\partial^{\lambda} c_1}{\partial y^{\lambda}} \right). \quad (2.9)$$

次に示す無次元数を利用して式 (2.9) の無次元化を行うことで、式 (2.11) が得られる.

$$C_1 = \frac{c_1}{c_0(0)}; C_0 = \frac{c_0(\tau)}{c_0(0)}; t = \frac{\tau}{\tau_0} = \frac{\tau d_1}{y_0^{(\lambda+1)/\nu}}; Y = \frac{y}{y_0}. \quad (2.10)$$

$$\frac{\partial^\nu C_1}{\partial t^\nu} = \frac{\partial}{\partial Y} \left(\frac{\partial^\lambda C_1}{\partial Y^\lambda} \right). \quad (2.11)$$

初期条件および境界条件は以下の通りである.

$$\begin{aligned} t = 0, C_1 &= 0, \\ Y = 0, C_1 &= C_0, \\ Y \rightarrow \infty, C_1 &\rightarrow 0. \end{aligned} \quad (2.12)$$

2.2.3 物質移動モデル 2: 非整数階微分を利用した移流拡散モデル

本節では、Fig.2.1 での帯水層部分の物質輸送を考える。周辺岩体よりもき裂が多く、また流速 v の流れが存在しているとの仮定から、拡散以外の物質輸送も考慮する。概念図を Fig.2.2 に示す。トレーサー濃度を c_2 とした一次元移流拡散方程式は次の通りである。

$$\frac{\partial c_2}{\partial \tau} + \xi \frac{\partial^\gamma c_2}{\partial \tau^\gamma} = \bar{D}_2 \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial^\lambda c_2}{\partial y^\lambda} \right) + D_2 \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial^\alpha c_2}{\partial x^\alpha} \right) - v \frac{\partial c_2}{\partial x} \quad (2.13)$$

$D_2[L^{1+\alpha}T^{-1}]$, $\bar{D}_2[L^{1+\alpha}T^{-1}]$ はそれぞれ帯水層内部における x 方向, y 方向への拡散係数である。 c_2 は帯水層でのトレーサー濃度, $h[L]$ は帯水層厚の半分, $v[LT^{-1}]$ は流速である。簡単のため、帯水層内部の濃度を c_2 の総量 $c = \int_{-h}^0 c_2 dy$ で置き換えると、式 (2.13) は次のように書き換えられる。

$$\frac{\partial c}{\partial \tau} + \xi \frac{\partial^\gamma c}{\partial \tau^\gamma} = \frac{D_1}{h} \frac{\partial^\lambda c_1}{\partial y^\lambda} \Big|_{y=0} + D_2 \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial^\alpha c}{\partial x^\alpha} \right) - v \frac{\partial c}{\partial x} \quad (2.14)$$

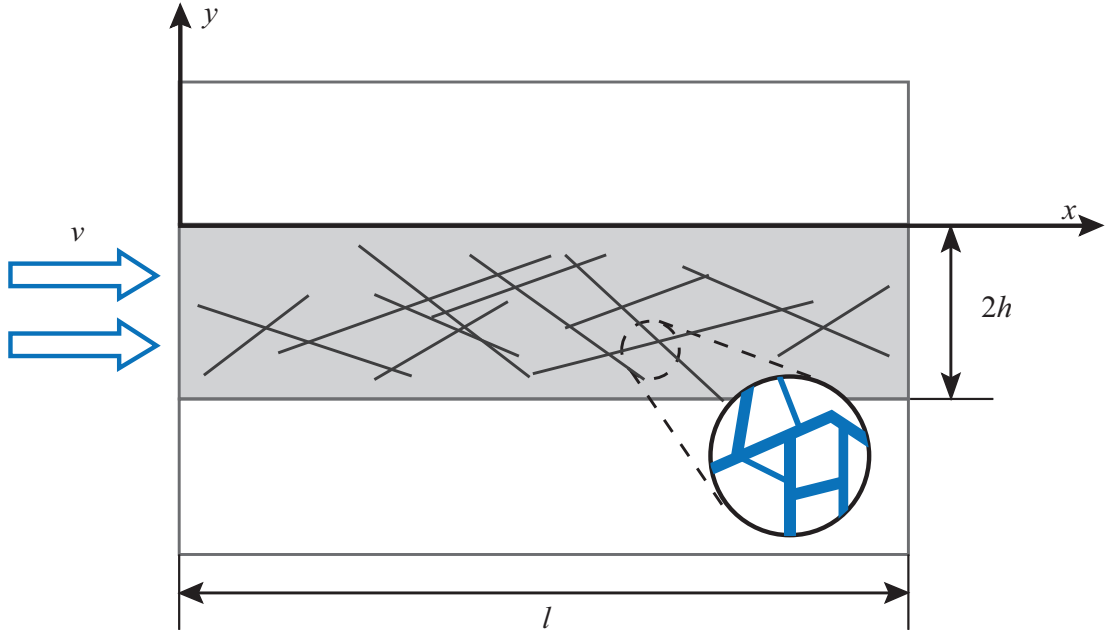


Fig. 2.2: 帯水層の概念

次に、以下に示す無次元数を導入して式 (2.14) を無次元化した。無次元化された方程式は式 (2.16) となる。

$$C_1 = \frac{c_1}{c_0(0)}; C = \frac{c}{c_0(0)}; C_0 = \frac{c_0(\tau)}{c_0(0)}; Pe = \frac{vl^\alpha}{D_2} = \frac{v(h^{\lambda+1}v/D_1)^\alpha}{D_2}; \quad (2.15)$$

$$t = \frac{\tau}{\tau_m} = \frac{\tau D_1}{h^{\lambda+1}}; b = \xi \left(\frac{h^{\lambda+1}}{D_1} \right)^{1-\gamma}; X = \frac{x}{l} = \frac{D_1 x}{(h^{\alpha+1}v)}; Y = \frac{y}{h}.$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} + b \frac{\partial^\gamma C}{\partial t^\gamma} = \frac{\partial^\lambda C_1}{\partial Y^\lambda} \Big|_{Y=0} - \frac{\partial C}{\partial X} + \frac{1}{Pe} \frac{\partial}{\partial X} \left(\frac{\partial^\alpha C}{\partial X^\alpha} \right), \quad (2.16)$$

ここで、式 (2.16) の右辺第一項である周辺岩体への拡散項を以下の関係式で時間微分項へと置き換える。

$$\frac{\partial^\lambda C_1}{\partial Y^\lambda} \Big|_{Y=0} = - \frac{\partial^\beta C}{\partial t^\beta} \quad (2.17)$$

これにより、帯水層での最終的な移流拡散方程式は式 (2.18) と表すことができる。また、初期条件および境界条件も次のように書き換えられる。

$$\frac{\partial C}{\partial t} + b \frac{\partial^\gamma C}{\partial t^\gamma} + \frac{\partial^\beta C}{\partial t^\beta} = -\frac{\partial C}{\partial X} + \frac{1}{Pe} \frac{\partial}{\partial X} \left(\frac{\partial^\alpha C}{\partial X^\alpha} \right), \quad (2.18)$$

$$t = 0, C = 0;$$

$$X = 0, C = C_0(t); \quad (2.19)$$

$$X \rightarrow \infty, C \rightarrow 0.$$

式 (2.18) の各項が定義している物質輸送は Fig.2.1 の通りである。式 (2.18) の左辺第 1 項から順にそれぞれの項を I, II, III, IV, V として対象となる地殻媒体中での物質輸送を関連付けた。I は蓄積項である。非整数階微分となる時間微分項である II は帯水層のより微小な領域への拡散を意味する。もう一つの非整数階微分を含む時間微分項の III は周辺岩体への拡散となる。右辺第 1 項の IV は帯水層 x 方向への移流項、非整数階微分となる空間微分項である V は帯水層 x 方向への拡散を意味する。

2.3 物質移動モデルの数値解法

2.3.1 非整数階微分を含む項の離散化

2.2 節で導出した数理モデルによる物質輸送解析を行うための数値計算プログラムを開発する。数値計算には差分法を利用し、計算条件に制約の少ない陰解法で解を求めるものとする。計算結果は、同一条件で算出された解析解との比較検討を行うことでその妥当性を確認した。はじめに、非整数階微分を含んだ微分項の離散化方法について説明する。

非整数階微分を含んだ項を差分化する場合には、その定義を考慮して離散化を行う必要がある。ここでは、Riemann-Liouville による定義と Caputo による定義それぞれの差分化

について述べる．Riemann-Liouville の非整数階微分は次のように表すことが可能である．

$${}^{R-L}D_x^\alpha f(x) = \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \frac{\partial^n}{\partial x^n} \int_a^x \frac{f(\xi)}{(x-\xi)^{\alpha+1-n}} d\xi, \quad (n-1 < \alpha < 1). \quad (2.20)$$

Caputo の定義による非整数階微分は次式の通りである．

$${}_a^C D_x^\alpha f(x) = \frac{1}{\Gamma(\alpha-n)} \int_a^x \frac{f^{(n)}(\xi)}{(x-\xi)^{\alpha+1-n}} d\xi, \quad (n-1 < \alpha < 1). \quad (2.21)$$

式 (2.20) に示す Riemann-Liouville による非整数階微分の場合は次式のように離散化することが可能である [5, 6].

$$\frac{\partial^\alpha f(x)}{\partial x^\alpha} \approx \frac{1}{(\Delta x)^\alpha} \sum_{i=0}^{j+1} \frac{\Gamma(-\alpha+i)}{\Gamma(-\alpha)\Gamma(i+1)} f_{j-(i-1)}. \quad (2.22)$$

ここで， $\Gamma(x)$ はガンマ関数である．

本研究で使用している Caputo の定義による非整数階微分の場合においては，関数の初期値を考慮した変数変換を行うことで式 (2.22) による離散化が可能となる．ここでは例として， $f(0) = C_0 (\neq 0)$ である関数 $f(x)$ の α 階微分項を離散化する場合を紹介する．始めに，関数 $f(x)$ の α 階微分を Caputo の定義，Riemann-Liouville の定義それぞれの形で記述する．式 (2.21)，式 (2.20) より次のように表現できる．

$${}_0^C D_x^\alpha f(x) = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_0^x \frac{1}{(x-\xi)^\alpha} \frac{\partial f(\xi)}{\partial x} d\xi. \quad (2.23)$$

$${}^{R-L}D_x^\alpha f(x) = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \frac{\partial}{\partial x} \int_0^x \frac{f(\xi)}{(x-\xi)^\alpha} d\xi. \quad (2.24)$$

式 (2.23)，式 (2.24) にそれぞれ $x = 0$ を代入する．

$${}_0^C D_x^\alpha f(0) = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_0^x \frac{1}{x^\alpha} \frac{\partial C_0}{\partial x} d\xi = 0. \quad (2.25)$$

$${}^{R-L}D_x^\alpha f(0) = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \frac{\partial}{\partial x} \int_0^x \frac{C_0}{x^\alpha} d\xi = \frac{C_0 x^{-\alpha}}{\Gamma(1-\alpha)}. \quad (2.26)$$

前提から $f(0) = C_0 \neq 0$ であるため、式 (2.23) と式 (2.24) は等しくならない。0 とならない式 (2.26) を使用すると、式 (2.23) と式 (2.24) の関係は次の式で表すことができる。

$${}_0^C D_x^\alpha f(x) = {}_0^{R-L} D_x^\alpha f(x) - \frac{x^{-\alpha}}{\Gamma(1-\alpha)}. \quad (2.27)$$

式 (2.26) を使用して書き換えると次式となる。

$${}_0^C D_x^\alpha f(x) = {}_0^{R-L} D_x^\alpha f(x) - {}_0^{R-L} D_x^\alpha f(0). \quad (2.28)$$

$f(0) = C_0$ を使用して式をまとめると次式が得られる。

$${}_0^C D_x^\alpha f(x) = {}_0^{R-L} D_x^\alpha [f(x) - C_0]. \quad (2.29)$$

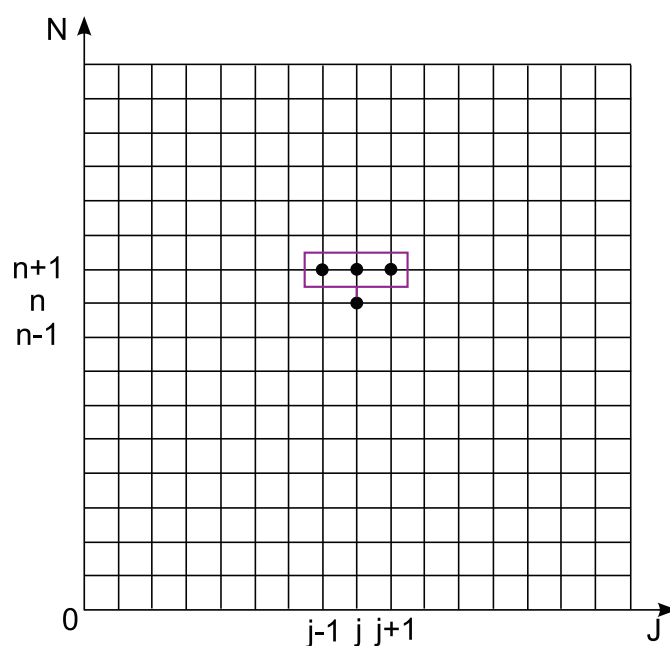
$f(x) - C_0 = U(x)$ とおくことで、Caputo の定義による関数 $f(x)$ の非整数階微分は Riemann-Liouville の定義による関数 $U(x)$ の非整数階微分として取り扱うことができる。よって、下記のとおり式 (2.22) を利用して離散化が可能となる。また、変数変換にともなって初期条件・境界条件も変化する。

$$\frac{\partial^\alpha U}{\partial x^\alpha} \approx \frac{1}{(\Delta x)^\alpha} \sum_{i=0}^{j+1} \frac{\Gamma(-\alpha+i)}{\Gamma(-\alpha)\Gamma(i+1)} U_{j-(i-1)}. \quad (2.30)$$

非整数階微分を含んだ拡散方程式と、Fick 則に基づいた拡散方程式をそれぞれ数値的に解いた場合の計算量を Fig.2.3 に示す。Fig.2.3 はある時刻における空間上の一点を陰解法で求めるために必要となる情報量である。Fig.2.3(a) の拡散方程式では、一点あたり三点の情報が必要とするのに対して、非整数階微分を含んだ方程式となる Fig.2.3(b) では原点からの全情報を必要としている。そのため、計算量は増大する。同様に、時間微分項に非整数階微分が含まれる場合も原点からの全情報を利用して計算を行うため、計算時間は飛躍的に増加する。

(a) 一般的な拡散方程式

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial^2 C}{\partial X^2}$$



(b) 拡散項が非整数階微分
となる拡散方程式

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial X} \left(\frac{\partial^\alpha C}{\partial X^\alpha} \right)$$

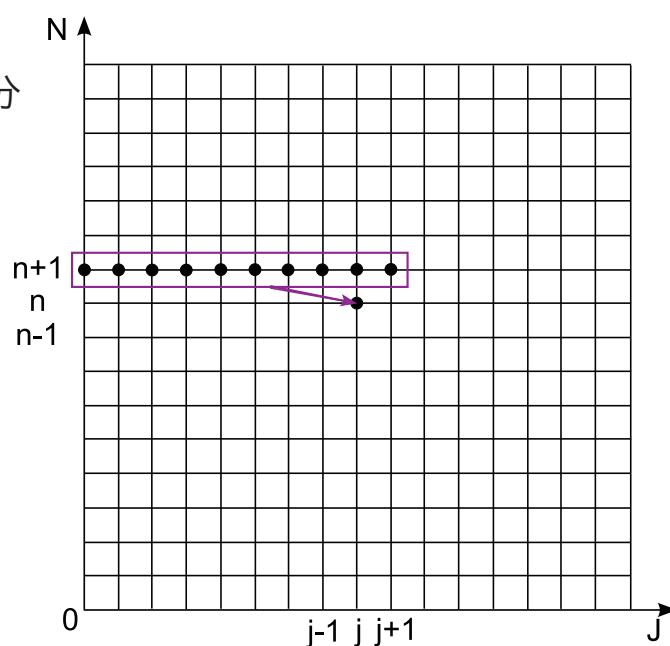


Fig. 2.3: 計算に必要な情報量の違い: (a) 一般的な拡散方程式, (b) 拡散項が非整数階微分となる拡散方程式

2.3.2 拡散方程式の数値計算

2.3.2.1 方程式の離散化

2.2.2 節で導出した帯水層の周辺に存在する岩体への物質輸送を表す拡散モデルの数値計算プログラムを開発した。導出した拡散方程式と初期条件・境界条件は以下の通りである。なお、初期条件において $C_0 = 1.0$ とした。

$$\frac{\partial^\nu C_1}{\partial t^\nu} = \frac{\partial}{\partial Y} \left(\frac{\partial^\lambda C_1}{\partial Y^\lambda} \right). \quad (2.31)$$

$$t = 0, C_1 = 0,$$

$$X = 0, C_1 = C_0 = 1.0, \quad (2.32)$$

$$X \rightarrow \infty, C_1 \rightarrow 0.$$

$C_1(0, t) = 1.0$ であるので、式 (2.31) の C_1 を $U + 1$ で置換したうえで処理を行う。

$$\frac{\partial^\nu U}{\partial t^\nu} = \frac{\partial^{\lambda+1} U}{\partial X^{\lambda+1}}, \quad (2.33)$$

初期条件・境界条件も U で書き換える。

$$t = 0, U = -1,$$

$$X = 0, U = 0, \quad (2.34)$$

$$X \rightarrow \infty, U \rightarrow -1.$$

得られた式 (2.33) の左辺について差分をとる。

$$\frac{\partial^\nu U}{\partial t^\nu} \approx \frac{1}{(\Delta t)^\nu} \sum_{k=0}^{n+1} \frac{\Gamma(-\nu + k)}{\Gamma(-\nu)\Gamma(k+1)} U^{n-(k-1)}. \quad (2.35)$$

右辺は以下のように書き換えられる。

$$\frac{\partial^{\lambda+1} U}{\partial X^{\lambda+1}} \approx \frac{1}{(\Delta X)^{\lambda+1}} \sum_{i=0}^{j+1} \frac{\Gamma(-(\lambda+1) + i)}{\Gamma(-(\lambda+1))\Gamma(i+1)} U_{j-(i-1)}. \quad (2.36)$$

Table. 2.1: 計算条件

変数	数値
距離: X	100
時間: t	100
距離の分割数: N_x	1000
時間の分割数: N_t	10000
トレーサー投入時間: t_{in}	100.0

両辺をまとめると次式を得る,

$$\frac{1}{(\Delta t)^v} \sum_{k=0}^{n+1} G_k^v U_j^{n-(k-1)} = \frac{1}{(\Delta X)^{\lambda+1}} \sum_{i=0}^{j+1} G_i^\lambda U_{j-(i-1)}^{n+1}. \quad (2.37)$$

G は非整数階微分を含んだ項を差分化によって生じる係数である．式中に存在する非整数階微分項それぞれについて存在し，ガンマ関数を利用して次のように表される．

$$G_i^\lambda = \frac{\Gamma(-(\lambda+1)+i)}{\Gamma(-(\lambda+1))\Gamma(i+1)}, \quad (2.38)$$

$$G_k^v = \frac{\Gamma(-v+k)}{\Gamma(-v)\Gamma(k+1)}. \quad (2.39)$$

2.3.2.2 計算結果とその妥当性

開発した数値計算プログラムによる式 (2.11) の計算結果の妥当性を検討した．計算条件として Table.2.1 を設定した計算結果と解析解を次に示す．Fig.2.4 は時刻 $t = 10$ でのトレーサー濃度の空間分布について，解析解と数値計算結果の比較を行ったものである．図中の実線が解析解，点が数値計算から得られたグラフである．Fig.2.4 から確認できるように，非整数階微分となる計算条件でも計算結果は解析解とよく一致していることが確認できる．

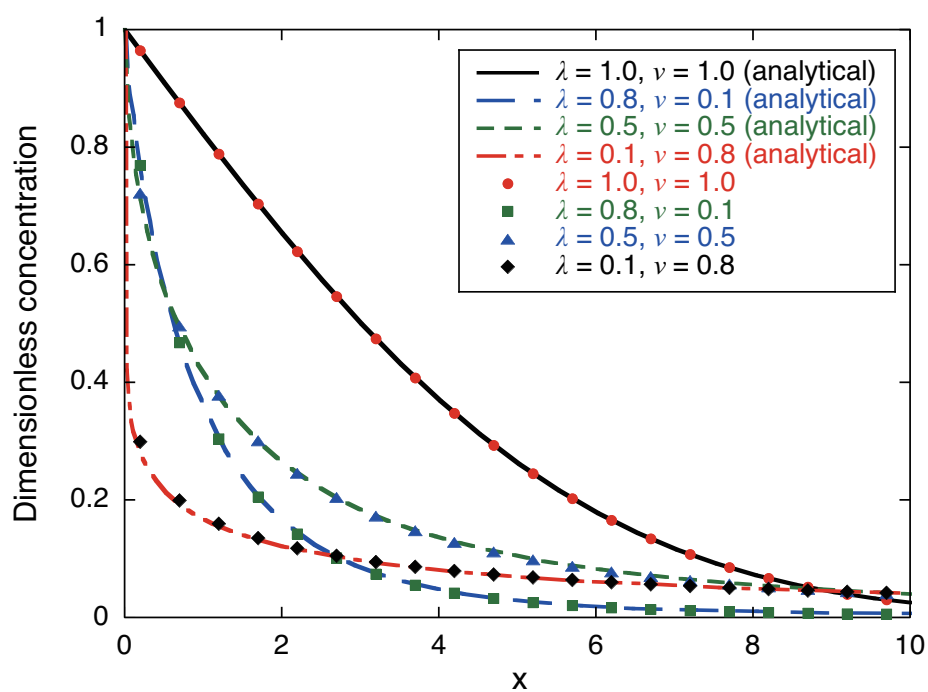


Fig. 2.4: 時刻 $t = 10$ でのトレーサー濃度分布

2.3.3 移流拡散方程式の数値計算

2.3.3.1 方程式の離散化

帯水層での物質輸送を推定する移流拡散方程式の数値計算プログラムを開発した。2.2.3節で導出した移流拡散方程式とその初期条件・境界条件は次の通りである。

$$\frac{\partial C}{\partial t} + b \frac{\partial^\gamma C}{\partial t^\gamma} + \frac{\partial^\beta C}{\partial t^\beta} = -\frac{\partial C}{\partial X} + \frac{1}{Pe} \frac{\partial}{\partial X} \left(\frac{\partial^\alpha C}{\partial X^\alpha} \right), \quad (2.40)$$

$$t = 0, C = 0,$$

$$X = 0, C = C_0(t), \quad (2.41)$$

$$X \rightarrow \infty, C \rightarrow 0.$$

初期条件から $X = 0$ で $C \neq 0$ となる場合があるため、式(2.40)の C を $U + C_0$ で置き換える。

$$\begin{aligned} \frac{\partial(U+C_0)}{\partial t} + b \frac{\partial^\gamma(U+C_0)}{\partial t^\gamma} + \frac{\partial^\beta(U+C_0)}{\partial t^\beta} \\ = -\frac{\partial(U+C_0)}{\partial X} + \frac{1}{Pe} \frac{\partial}{\partial X} \left(\frac{\partial^\alpha(U+C_0)}{\partial X^\alpha} \right). \end{aligned} \quad (2.42)$$

$C(0, t) = C_0(t)$ なので整理すると次式を得る。

$$\frac{\partial(U+C_0)}{\partial t} + b \frac{\partial^\gamma(U+C_0)}{\partial t^\gamma} + \frac{\partial^\beta(U+C_0)}{\partial t^\beta} = -\frac{\partial U}{\partial X} + \frac{1}{Pe} \frac{\partial^{\alpha+1} U}{\partial X^{\alpha+1}}. \quad (2.43)$$

このときの初期条件・境界条件は以下の通りである。

$$t = 0, U = -C_0,$$

$$X = 0, U = 0, \quad (2.44)$$

$$X \rightarrow \infty, U \rightarrow -C_0.$$

式(2.43)の両辺を差分化する。左辺は次式のように書き換えられる。

$$\begin{aligned} \frac{\partial(U+C_0)}{\partial t} + b \frac{\partial^\gamma(U+C_0)}{\partial t^\gamma} + \frac{\partial^\beta(U+C_0)}{\partial t^\beta} \\ \approx \frac{(U+C_0)^{n+1} - (U+C_0)^n}{\Delta t} + \sum_{k=0}^{n+1} \left(\frac{b}{(\Delta t)^\gamma} G_k^\gamma + \frac{1}{(\Delta t)^\beta} G_k^\beta \right) (U+C_0)^{n-(k-1)}. \end{aligned} \quad (2.45)$$

右辺についても同様に離散化を行った．式 (2.43) の移流項には Yee らによる陰的 TVD 法を利用した [7]．

$$-\frac{\partial U}{\partial X} + \frac{1}{Pe} \frac{\partial^{\alpha+1} U}{\partial X^{\alpha+1}} \approx \frac{1}{(\Delta X)^2} (\tilde{f}_{j+1/2} - \tilde{f}_{j-1/2}) + \frac{1}{Pe} \frac{1}{\Delta X} \sum_{i=0}^{j+1} G_i^\alpha U_{j-(i-1)}. \quad (2.46)$$

両辺をまとめると次式を得る．

$$\begin{aligned} \frac{(U + C_0)_j^{n+1} - (U + C_0)_j^n}{\Delta t} + \sum_{k=0}^{n+1} \left(\frac{b}{(\Delta t)^\gamma} G_k^\gamma + \frac{1}{(\Delta t)^\beta} G_k^\beta \right) (U + C_0)_j^{n-(k-1)} \\ = \frac{1}{(\Delta X)^2} (\tilde{f}_{j+1/2}^{n+1} - \tilde{f}_{j-1/2}^{n+1}) + \frac{1}{Pe} \frac{1}{\Delta X} \sum_{i=0}^{j+1} G_i^\alpha U_{j-(i-1)}^{n+1}. \end{aligned} \quad (2.47)$$

拡散方程式の場合と同様に， G は次のように表現される．

$$G_i^\alpha = \frac{\Gamma(-(\alpha+1)+i)}{\Gamma(-(\alpha+1))\Gamma(i+1)}, \quad (2.48)$$

$$G_k^\beta = \frac{\Gamma(-\beta+k)}{\Gamma(-\beta)\Gamma(k+1)}, \quad (2.49)$$

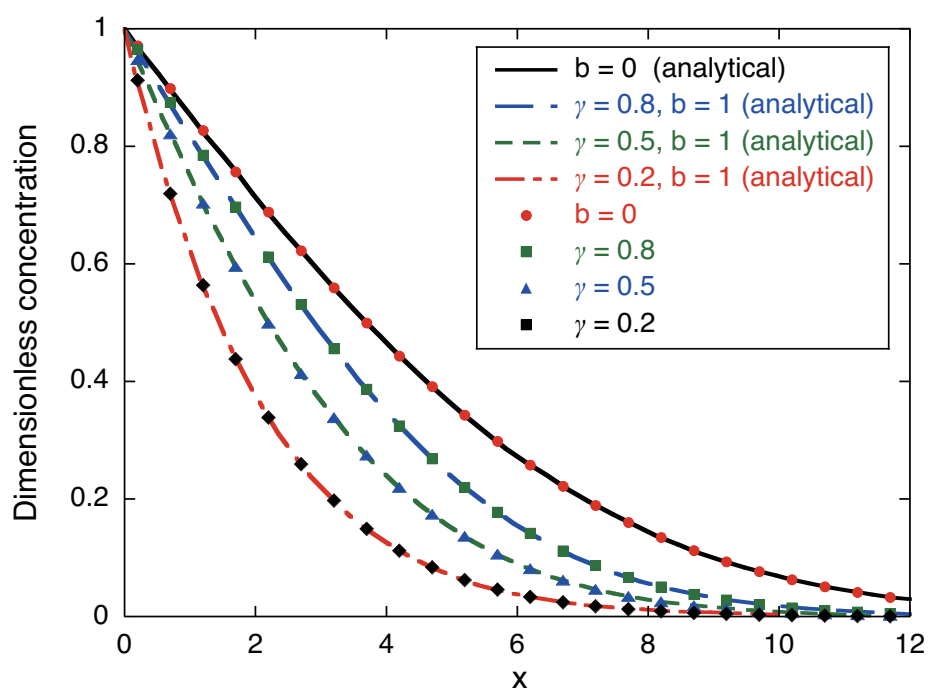
$$G_k^\gamma = \frac{\Gamma(-\gamma+k)}{\Gamma(-\gamma)\Gamma(k+1)}. \quad (2.50)$$

2.3.3.2 計算結果とその妥当性

Table.2.2 の下で式 (2.18) を計算した結果を以下に示す．Fig.2.5，Fig.2.6 はともに時刻 $t = 15$ におけるトレーサー濃度の空間分布を表すグラフである．いずれも実線が解析解，点が数値計算結果である．二つのグラフから確認できるように，計算結果は解析解と良く一致していることが確認できる．

Table. 2.2: 計算条件

変数	数値
距離: X	100
時間: t	100
距離の分割数: N_x	1000
時間の分割数: N_t	10000
トレーサー投入時間: t_{in}	100.0


Fig. 2.5: $Pe = 1$, $t = 15$ でのトレーサー濃度分布

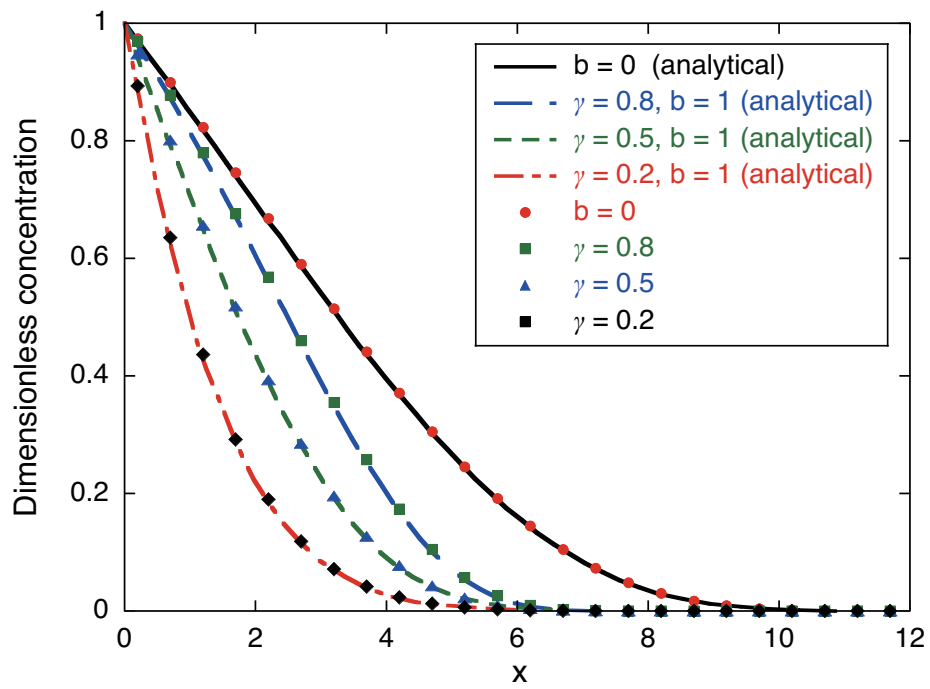


Fig. 2.6: $Pe = 100$, $t = 15$ でのトレーサー濃度分布

2.3.4 非整数階微分の定義による計算結果の相違

本研究では、Caputo によって定義された非整数階微分を使用して数理モデルを導出している。そのため、数値計算を行う際には定義を考慮したうえで離散化を行う必要がある。ここでは、式 (2.51) の拡散方程式を例にとって変数変換の有無によって生じる計算結果の違いについて検討を行った。拡散方程式と、初期条件、境界条件は次の通りである。

$$\frac{\partial^\nu C_1}{\partial t^\nu} = \frac{\partial}{\partial Y} \left(\frac{\partial^\lambda C_1}{\partial Y^\lambda} \right). \quad (2.51)$$

$$t = 0, C_1 = 0,$$

$$Y = 0, C_1 = 1.0, \quad (2.52)$$

$$Y \rightarrow \infty, C_1 \rightarrow 0.$$

式 (2.51) の変数変換を行わずに、式 (2.22) を直接適用して方程式を離散化した。左辺、右辺それぞれ離散化を行うと以下のように書き換えることができる。

$$\frac{\partial^\nu C_1}{\partial t^\nu} \approx \frac{1}{(\Delta t)^\nu} \sum_{k=0}^{n+1} \frac{\Gamma(-\nu+k)}{\Gamma(-\nu)\Gamma(k+1)} C_1^{n-(k-1)}. \quad (2.53)$$

$$\frac{\partial^{\lambda+1} C_1}{\partial Y^{\lambda+1}} \approx \frac{1}{(\Delta Y)^{\lambda+1}} \sum_{i=0}^{j+1} \frac{\Gamma(-(\lambda+1)+i)}{\Gamma(-(\lambda+1))\Gamma(i+1)} C_1^{j-(i-1)}. \quad (2.54)$$

両辺をまとめることで次式が得られる。

$$\frac{1}{(\Delta t)^\nu} \sum_{k=0}^{n+1} G_k^\nu C_1^{n-(k-1)} = \frac{1}{(\Delta Y)^{\lambda+1}} \sum_{i=0}^{j+1} G_i^\lambda C_1^{j-(i-1)}. \quad (2.55)$$

ここで、

$$G_i^\lambda = \frac{\Gamma(-(\lambda+1)+i)}{\Gamma(-(\lambda+1))\Gamma(i+1)}, \quad (2.56)$$

$$G_k^\nu = \frac{\Gamma(-\nu+k)}{\Gamma(-\nu)\Gamma(k+1)}. \quad (2.57)$$

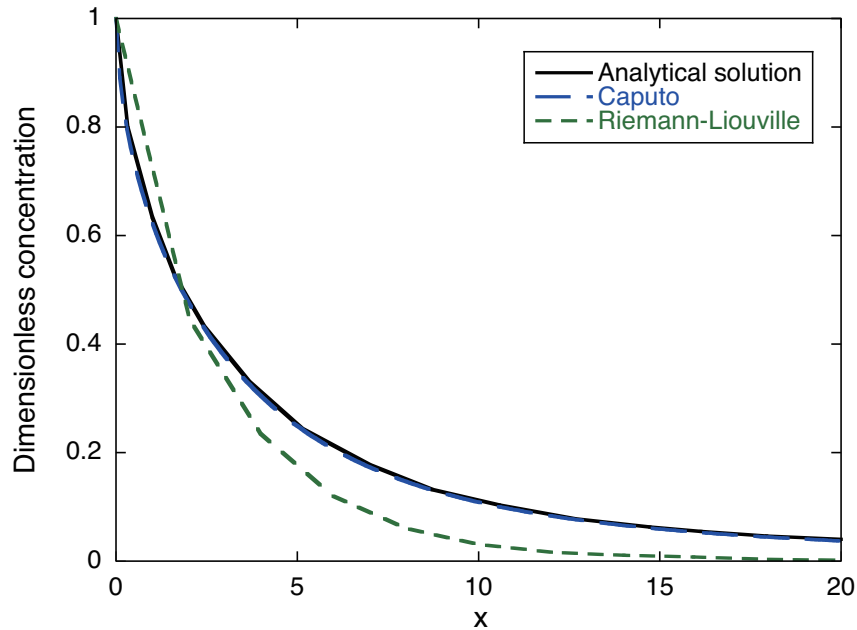


Fig. 2.7: 差分の取り方による結果の変化

得られた式 (2.55) による計算結果と、Caputo の定義を考慮した式 (2.37) の計算結果との比較を行った。Fig.2.7 は時刻 $t = 10$, $\lambda = 0.5$, $\nu = 1.0$ でのトレーサー濃度分布をである。計算結果の妥当性を確認するため、解析解も合わせて掲載している。Fig.2.7 から確認できるように、定義を考慮した変数変換を行わない場合には、計算結果が解析解から大きく外れてしまうことがわかる。したがって、関数の初期条件を考慮した変数変換は妥当な解を得るために必要であることが確認できる。

2.4 結言

複雑な地殻媒体を対象として、非整数階微分を含んだ移流拡散方程式に基づく物質移動モデルを提案した。また、その数値計算プログラムを構築した。以下に本章で得られた知見を述べる。

1. 複雑な地殻媒体を対象とした物質輸送の推定を目的として、非整数階微分を利用した移流拡散方程式による数理モデルを提案した。
2. 非整数階微分を含んだ移流拡散方程式の数値解法として、差分法を利用した数値計算コードを開発した。
3. 初期値問題を考慮した定義の選定と変数変換により、Caputo による非整数階微分を含む項は Riemann-Liouville の定義による項と同様に離散化が可能となった。
4. 開発した数値計算コードによる計算結果は、同一条件で得られた解析解とよく一致していることが確認された。

参考文献

- [1] David A. Benson, Stephen W. Wheatcraft, and Mark M. Meerschaert. Application of a fractional advection-dispersion equation. *Water Resources Research*, Vol. 36, No. 6, pp. 1403–1412, June 2000.
- [2] Rina Schumer, David A. Benson, Mark M. Meerschaert, and Boris Baeumer. Multiscaling fractional advection-dispersion equations and their solutions. *Water Resources Research*, Vol. 39, No. 1, p. WR001229, 2003.
- [3] Sergei Fomin, Vladimir Chugunov, and Toshiyuki Hashida. The effect of non-fickian diffusion into surrounding rocks on contaminant transport in a fractured porous aquifer. *Proceedings of the Royal Society A*, Vol. 461, pp. 2923–2939, 2005.
- [4] Sergei A. Fomin and Vladimir A. Chugunov. *Mathematical Modeling of Mass Transport in Complex Media*, Vol. 7 of *The 21st Century COE Program International COE of Flow Dynamics Lecture Series*. Tohoku University Press, Sendai, Japan, October 2007.
- [5] S. G. Samko, A. A. Kilbas, and O. I. Marichev. *Fractional Integrals and Derivatives: Theory and Applications*. Gordon and Breach, London, 1993.
- [6] 広田良吾. 差分方程式講義 連続より離散へ, SGC ライブラリ, 第8巻. サイエンス社, 10 2000.
- [7] H.C. Yee and A. Harten. Implicit TVD Schemes for Hyperbolic Conservation Laws in Curvilinear Coordinates. *AIAA Journal*, Vol. 25, No. 2, pp. 266–274, February 1987.

第3章 非整数階微分の階数と物質輸送の関係

3.1 緒言

地殻複雑媒体での物質移動から流体の移動傾向を把握するために、2章では非整数階微分を含んだ物質輸送数理モデルを提案した。2章で導出した通り、この数理モデルは特定の物理量を直接反映していない変数によって構成されている。そのため、少ない変数で現象を表現可能な利点を有しているものの、各々の変数が物質輸送に及ぼす影響は複雑なものとなっている。そのため、本数理モデルを利用して物質輸送を定量的に評価するためには、これら変数が及ぼす挙動と変数の物理的意味を把握していく必要がある。現在、変数の取りうる値やトレーサー試験などから変数の物理的な意味については報告され始めてはいるものの [1–3]、断片的な報告にとどまり体系的な議論は進んでいない。本章では、数理モデルに含まれる変数が及ぼすトレーサー応答や空間分布への影響を検討する。

3.2 計算条件

変数が物質輸送に及ぼす影響を検討するために、前章で開発した数値計算プログラムを使用して変数ごとに数値計算を行った。式 (3.1) の移流拡散方程式を使用している。また、投入条件の違いによるトレーサー応答の変化を検討するため、初期条件の異なる2種類の計算条件を設定した。それぞれ恒常的にトレーサーを投入する条件、トレーサーの投入を一定時間後に打ち切る条件を設定した。また、観測値としてトレーサーの空間的な濃度分

Table. 3.1: 変数の挙動解析に使用した計算条件

条件 1	条件 2
$t = 0, C = 0$	$t = 0, C = 0$
$X = 0, C = 1.0$	$X = 0, C = C_0(t)$
$X \rightarrow \infty, C \rightarrow 0$	$X \rightarrow \infty, C \rightarrow 0$

布曲線と，時間応答曲線を使用した．

$$\frac{\partial C}{\partial t} + b \frac{\partial^\gamma C}{\partial t^\gamma} + \frac{\partial^\beta C}{\partial t^\beta} = -\frac{\partial C}{\partial X} + \frac{1}{Pe} \frac{\partial}{\partial X} \left(\frac{\partial^\alpha C}{\partial X^\alpha} \right) \quad (3.1)$$

変数の検討に先立って，式 (3.1) に含まれる変数をその位置や形態から 3 種類に分類した．分類したものそれぞれについて，検討を行った．

1. 時間微分項に含まれる微分係数 (式 (3.1) 左辺第 2 項，第 3 項)
2. 空間微分項に含まれる微分係数 (式 (3.1) 右辺第 2 項)
3. 微分係数以外の変数 (式 (3.1) 左辺第 2 項，右辺第 2 項)

3.3 時間微分項に存在する微分係数の影響

34 ページの式 (3.1) に存在する時間微分項の微分係数に関して，その影響を検討した．計算条件 1 のもとで時間微分項に含まれる微分係数 γ を変化させた場合の計算結果を Fig.3.1 に示す．式 (3.3) に示す移流拡散方程式による計算結果を掲載している．

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{\partial C}{\partial X} + \frac{1}{Pe} \frac{\partial^2 C}{\partial X^2} \quad (3.2)$$

Fig.3.1 から確認できるように，一般的な移流拡散方程式と比べてトレーサの移動距離が非常に小さくなっており，流れ方向への物質輸送が抑制されていることがわかる．ま

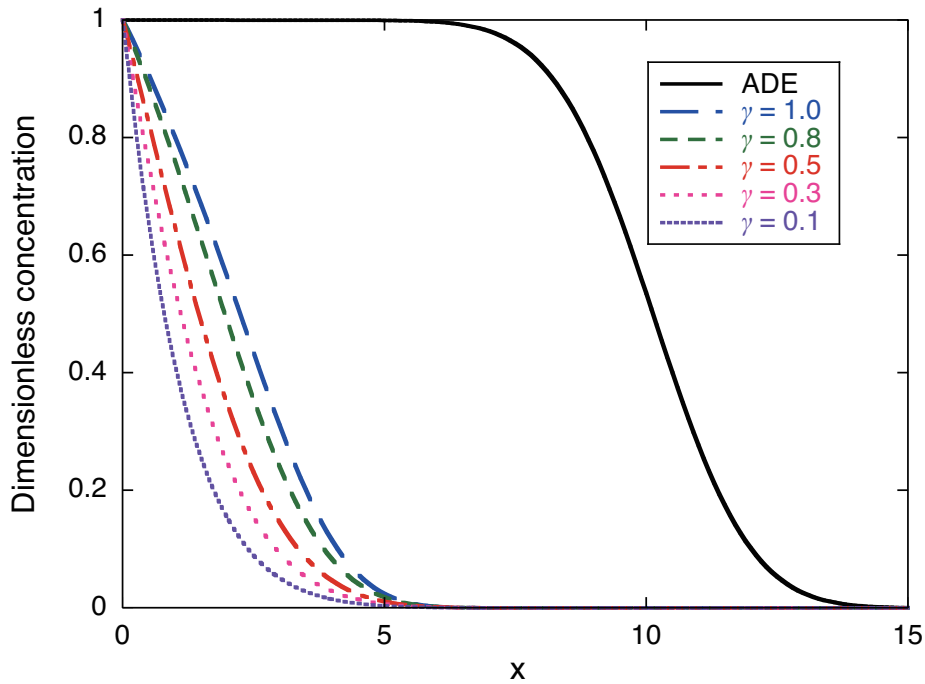


Fig. 3.1: トレーサー分布曲線に見られる γ の影響 (条件 1). ADE は式 (3.3) によるもの.

た, Fig.3.2 から, $\gamma = 0.5$ を境界として濃度分布曲線の傾向が変化していることが確認できる. γ が 0.5 を下回ると濃度分布曲線は拡散方程式に似た形状を示し, 見かけ上移流による物質輸送が消失している. また, Fig.3.5 から, 式 (3.1) に存在するもう一つの非整数階となる微分係数である β に関しても同様のことが確認できる. 以上より, 係数が非整数階となる時間微分項を有する方程式が示す挙動は, 次のようにまとめられる. 時間微分項が存在することで, そうでない方程式よりもある時刻 t に観測されるトレーサー物質量が減少してしまう. また, トレーサー分布曲線が原点方向に移動していることが確認できる. これらのことから, トレーサーそのものの移動を抑制する効果を有していることが確認できる. また, 微分係数の減少にともなって, 濃度分布で観測されるトレーサーの最大値が減少していくことが確認された. トレーサー応答曲線についても同様に, 最大値の減少が確認できる. また, Fig.3.4 から確認できるように, トレーサー応答曲線では顕著なテーリングが観測されるようになる. 一般に, 微分係数が 1 を超えるときの拡散挙動を Superdiffusion, 1 を下回るときのものを Subdiffusion と呼ぶことが知られている [2, 4].

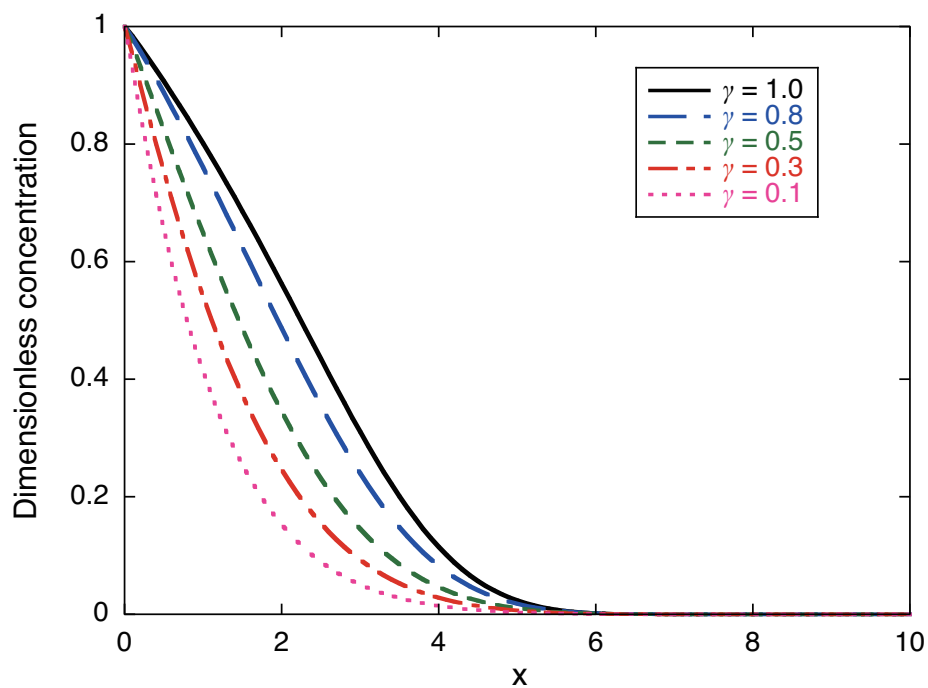


Fig. 3.2: トレーサー分布曲線に見られる γ の影響 (条件 1).

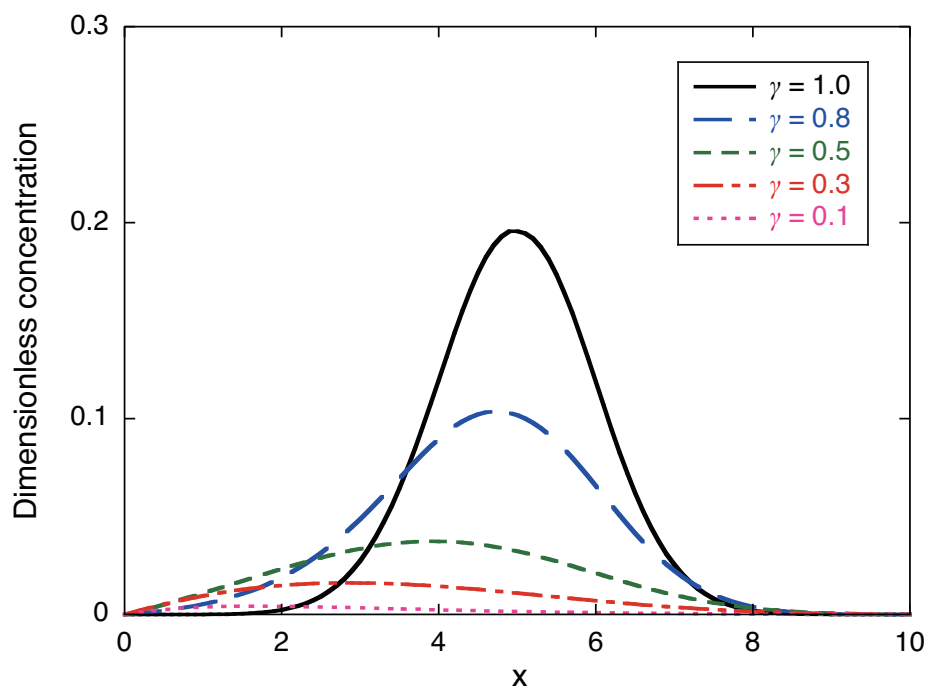


Fig. 3.3: トレーサー分布曲線に見られる γ の影響 (条件 2).

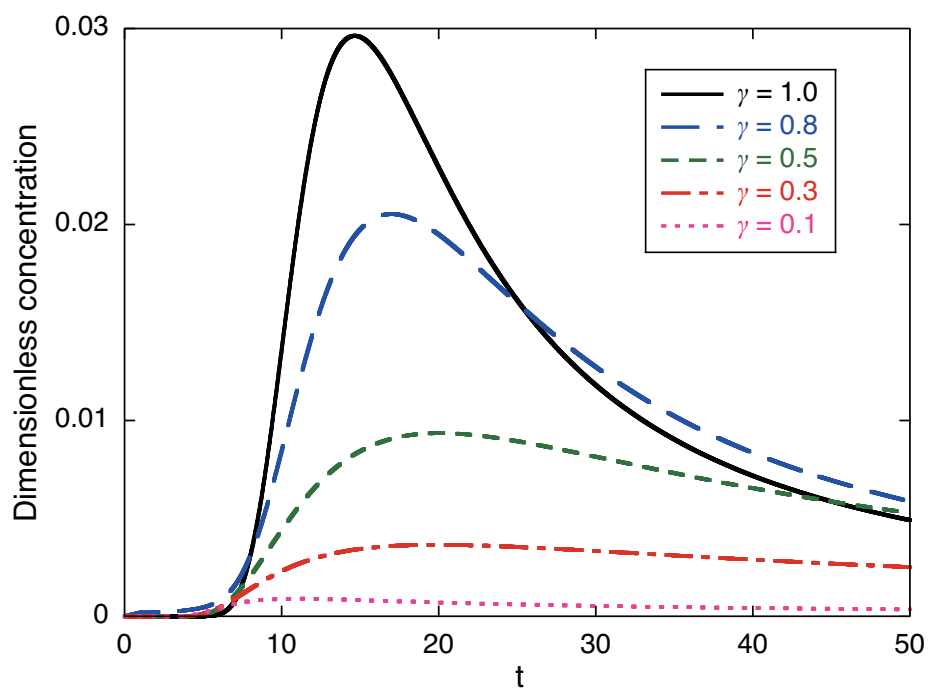


Fig. 3.4: トレーサーの時間応答に及ぼす γ の影響 (条件 2).

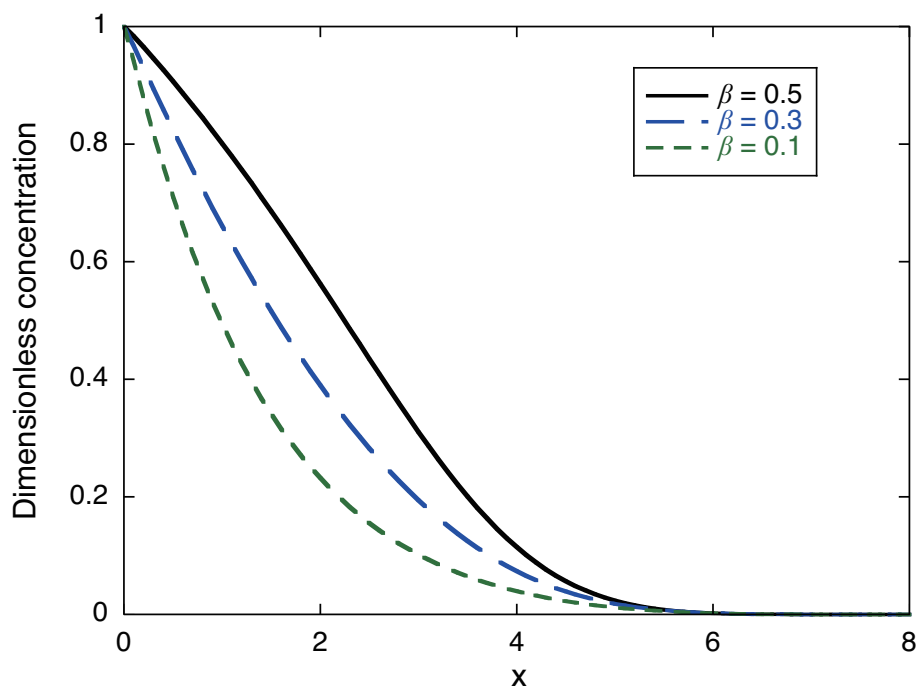
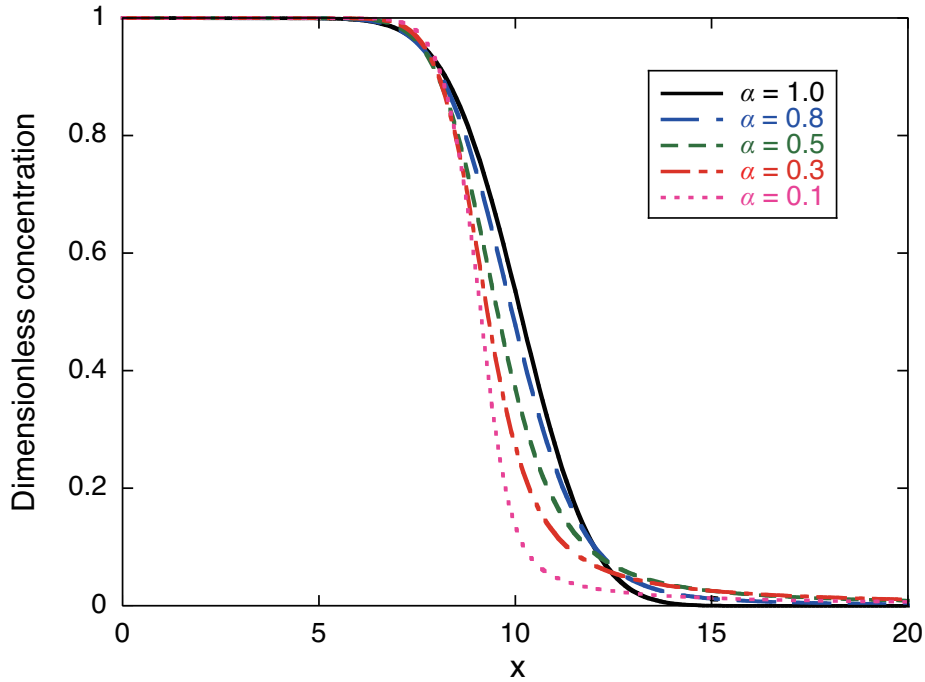


Fig. 3.5: トレーサー分布曲線に見られる β の影響 (条件 1).


 Fig. 3.6: トレーサー分布曲線に見られる α の影響 (条件 1)

本節で観測された挙動は Subdiffusion に準じた挙動を示していることが確認できる。

3.4 空間微分項に存在する微分係数の影響

式 (3.1) にの空間微分項に含まれる微分係数の影響を検討した。Fig. 3.6, 3.7 はそれぞれ、条件 1, 条件 2 で計算されたトレーサーの空間分布である。本研究で提示している数理モデルでは、微分係数が非整数階次となる空間微分項は拡散による物質輸送を示す項である。とくに、 $\alpha = 1$ のとき Fick の第 2 法則を満足する拡散となる。また、拡散効果が付加されるため、トレーサー分布曲線がなだらかとなる。この微分係数が減少すると、同一時刻でのトレーサー分布を比較した場合、トレーサーの最大到達距離がより長くなる。逆に、投入点側でのトレーサー濃度は減少する。トレーサーの濃度変化を比較した場合には、観測されるトレーサー最大値の減少と、到達開始時刻の早期化が確認できる。空間項が非整数階微分の場合、同じ経過時間であるときは微分係数 α が小さいほど注入点近傍

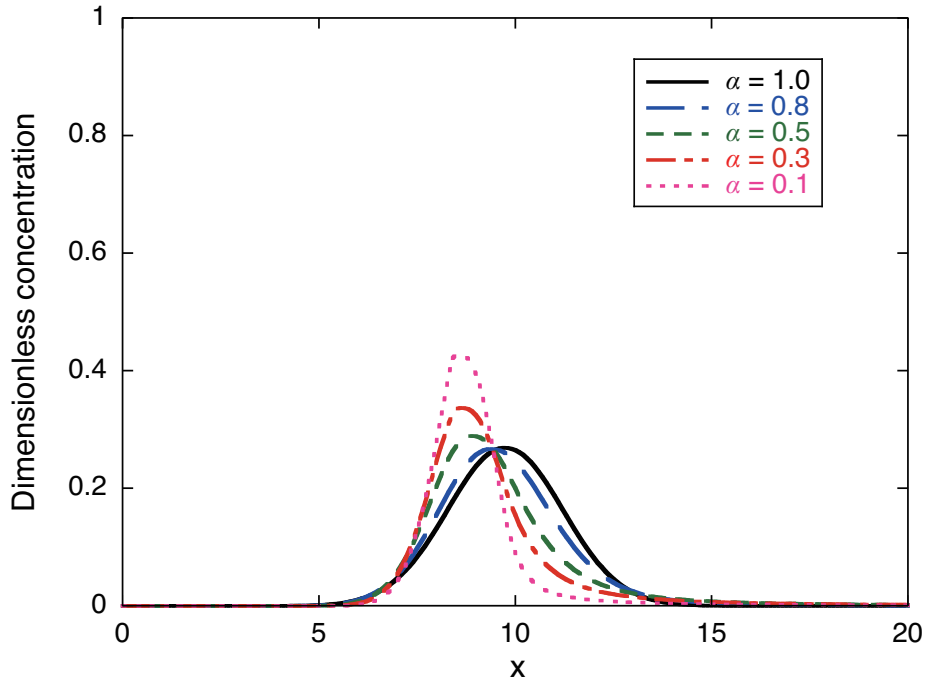


Fig. 3.7: トレーサー分布曲線に見られる α の影響 (条件 2)

での濃度が低下している。そして距離が遠くなるほど逆に濃度は高くなる。

3.5 微分係数以外の変数による影響

34 ページの式 (3.1) には、微分係数以外の変数として時間微分項にかかる変数 b と空間微分項にかかる変数 Pe が存在している。これらは微分項に直接付加されているため、微分係数とは異なる挙動を示すことが考えられる。この変数それぞれについて、物質輸送への影響を検討した。

3.5.1 時間微分項同士の影響を表す変数

式 (3.1) の左辺第 2 項の係数 b が及ぼす影響を検討した。第 2 章で定義したとおり、この変数は帯水層の微小領域への拡散と周辺岩体への拡散度合いを表す変数である。そのた

め、 b が及ぼす影響は2つの微分係数 β, γ の大小関係によって変化すると考えられる。そこで、 $\beta > \gamma$, $\beta = \gamma$, $\beta < \gamma$ それぞれの条件で計算を行い、 b の与える影響を検討した。

Fig.3.8は条件2のもとで計算したトレーサーの濃度分布である。図中の(a),(b),(c)はそれぞれ $\beta > \gamma$, $\beta = \gamma$, $\beta < \gamma$ となる条件での計算結果となる。Fig.3.8から、微分係数の値によらない共通の傾向として、 b の減少とともに濃度分布の山が全体的として右方向に移動していることが確認できる。遅延効果をもたらす時間微分項の影響を減じる作用となるため、全体的な物質の移動速度が大きくなるものと考えられる。一方で、濃度分布曲線の最大値は β と γ の関係によって変化している。 $\gamma > \beta$ となる計算条件では、 b が小さくなるほど濃度の最大値は減少している。一方、それ以外の場合は逆に濃度の最大値は増加していることが確認できる。 b は式(3.1)の左辺第2項に直接かかる係数である。そのため、 b が減少すると左辺第2項の値が直接減少してしまう。したがって、相対的にもう一つの時間微分項の作用が顕著になるものと考えられる。微分係数の大小による濃度の最大値変化も同様の理由で説明が可能である。Fig.3.8の結果を利用して β と γ の大小と b の関係をFig.3.9に示す。Fig.3.9中のアルファベットA, B, Cはそれぞれ b が減少したときに観測される物質輸送の変化である。

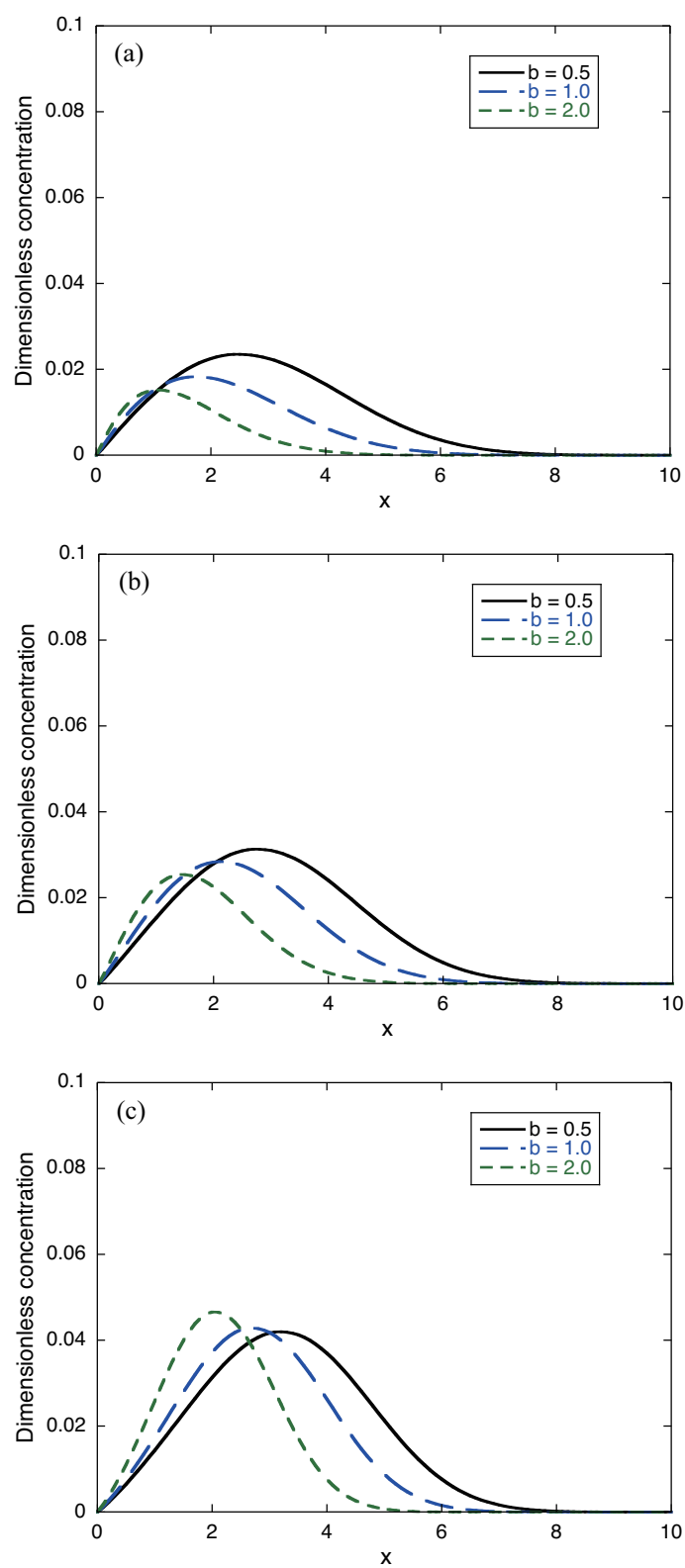


Fig. 3.8: トレーサー分布曲線に見られる変数 b の影響 (条件 2): (a). $\beta = 0.5, \gamma = 0.3$, (b). $\beta = 0.5, \gamma = 0.5$, (c). $\beta = 0.5, \gamma = 0.8$

		β				
		0.1	0.3	0.5	0.8	1.0
γ	0.1	C	C	C	C	C
	0.3	A	C	C	C	C
	0.5	A	A	C	C	C
	0.8	B	A	A	C	C
	1.0	B	A	A	A	C

変数 b の分類

A: 濃度分布曲線で確認できる濃度の最大値が減少
全体的なトレーサー移動速度の増加

B: 濃度分布曲線で確認できる濃度の最大値が減少
全体的なトレーサー移動速度の減少

C: 濃度分布曲線で確認できる濃度の最大値が増加
全体的なトレーサー移動速度の増加

Fig. 3.9: 濃度分布曲線の変化傾向で分類した b が減少するときの挙動

3.5.2 拡散挙動を制御する無次元数

本研究でペクレ数として定義している 34 ページの式 (3.1) 右辺第 2 項に存在する係数 Pe の影響を検討した。Fig.3.10 は式中の Pe を変えた場合の濃度分布曲線である。これから確認できるように、 Pe が小さいほど拡散による物質輸送が顕著になることが示されている。また、比較のために式 (3.3) の移流拡散方程式で計算した Pe の影響を Fig.3.11 に示す。Fig.3.10 で観察された結果は Fig.3.11 に見られるペクレ数の挙動と同様であることが確認できる。そのため、非整数解微分を含んだ移流拡散方程式の場合においても一般的な定義のペクレ数として取り扱うことが可能であると考えられる。

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{1}{Pe} \frac{\partial^2 C}{\partial X^2} - \frac{\partial C}{\partial X} \quad (3.3)$$

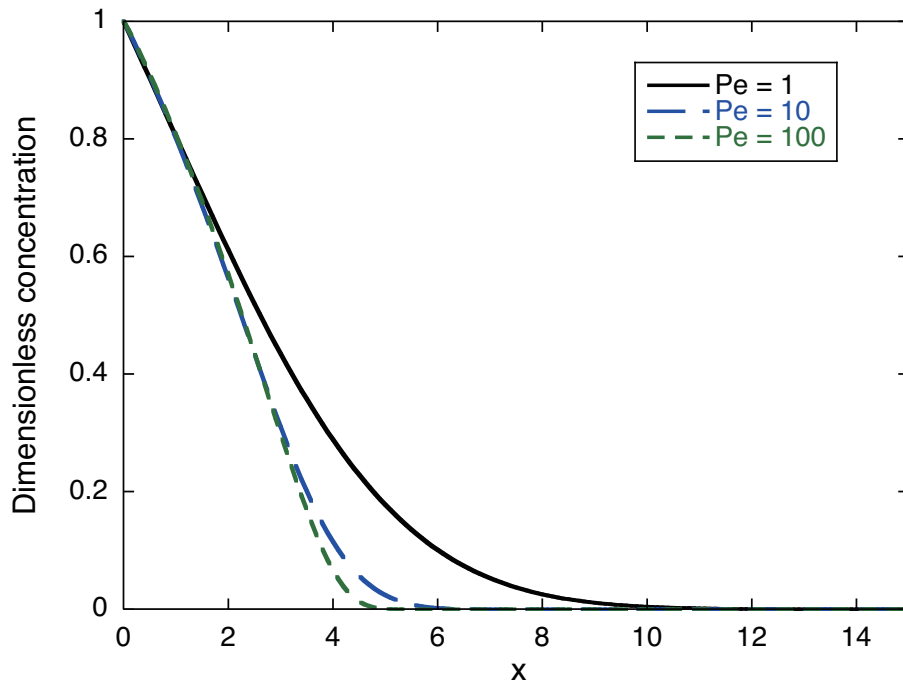


Fig. 3.10: Pe による濃度分布の変化

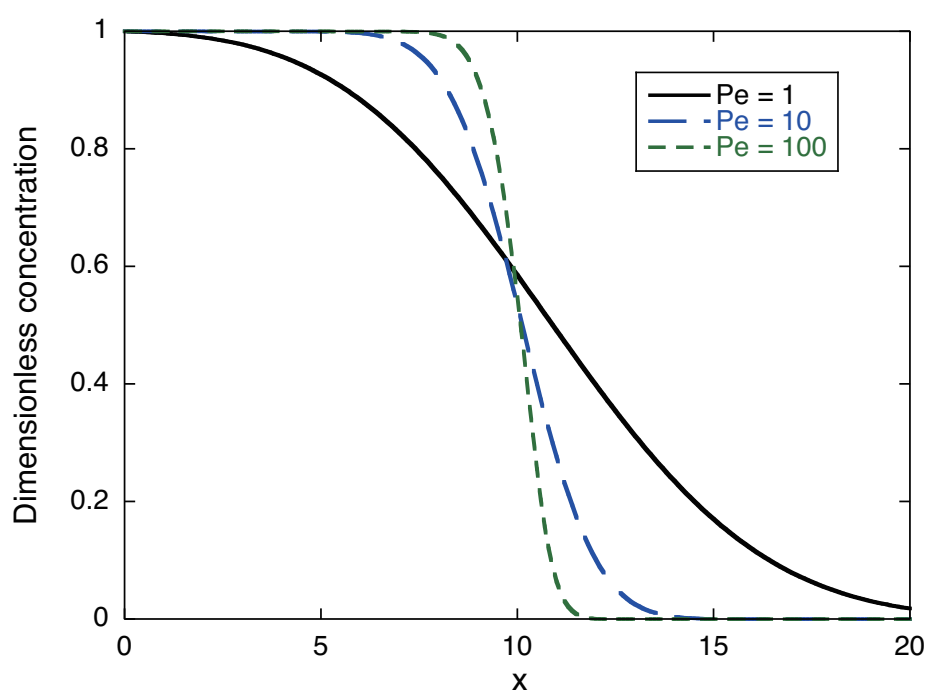


Fig. 3.11: 式 (3.3) における Pe による濃度分布の変化

3.6 結言

本研究で取り扱う数理モデルは、非整数階次となる微分係数をはじめとして岩石や流体の物性値を直接利用できない変数が複数存在している。そのため、変数が計算結果に及ぼす影響と帯水層内での物質輸送との関連を明確にしていく必要がある。本章では数理モデルに含まれる変数が計算結果に及ぼす影響と、物質輸送との関連をとりまとめた。以下に得られた知見を述べる。

1. 空間微分項の微分係数が変化した場合、濃度分布に見られるトレーサーの分布に変化が見られるようになる。
2. 時間微分項の微分係数が変化した場合、トレーサー応答でしばしば観測される長いテールが発生し始める。
3. 時間微分項同士の影響度合いに作用する係数は、値の増大とともに帯水層内部拡散の影響を大きくする。逆に小さくなる場合は周辺岩体への拡散度合いを強める作用を及ぼす。
4. ペクレ数 Pe は一般的な移流拡散方程式と同様に、移流と拡散の比率を示す無次元数である。空間微分項 α が含まれているため通常 Pe がとりうる値を示すとは限らないものの、その数値のもたらす結果は通常のペクレ数と変わらない。

参考文献

- [1] Yakov Pachepsky, David Benson, and Walter Rawls. Simulating scale-dependent solute transport in soils with the fractional advective-dispersive equation. *Soil. Sci. Soc. Am. J.*, Vol. 64, pp. 1234–1243, July-August 2000.
- [2] Remi-Ahmad El-Nabulsi. Fractional description of super and subdiffusion. *Physics Letters A*, Vol. 340, pp. 361–368, 2005.
- [3] Yong Zhang, David A. Benson, and Donald M. Reeves. Time and space nonlocalities underlying fractional-derivative models: Distinction and literature review of field applications. *Advances in Water Resources*, Vol. 32, pp. 561–581, 2009.
- [4] A.V. Chechkin, R. Gorenflo, and I.M. Sokolov. Retarding subdiffusion and accelerating superdiffusion governed by distributed-order fractional diffusion equations. *Physical Review E*, Vol. 66, , 2002.

第4章 パラメータ決定法の考案

4.1 緒言

本研究で提示している物質輸送数理モデルには複数の変数が存在している。そして、前章では各々の変数が物質輸送に与える影響を検討した。これらの変数はそのうち一つが変化しただけでもトレーサーの応答や分布曲線に顕著な変化を与えることが示されている。実際のトレーサー情報を利用して変数を規定するためには、トレーサー観測値に対してカーブフィッティングなどにより観測値を満足する変数の組み合わせを導く必要がある。しかしながら、本数理モデルに含まれる変数は物性値を直接反映した変数ではない。そのため、値の推測が難しいこと、および変数一つが物質輸送に与える影響が大きいことから手動による変数のすり合わせ作業は困難である。そのため、より効率的で客観的な手法を利用して変数を決定することが求められる。本章ではトレーサー試験を利用した数理モデルの変数決定プロセスを最適設計問題と定義し、その一種である非線形計画法に基づいた変数決定手法を開発した。

4.2 変数決定法の概要

最適設計問題とは自然科学・工学・社会科学などの分野で取り扱われる基本的な問題の一つである [1, 2]。与えられた条件の下で指標となる関数を最大もしくは最小とするような変数を決定する問題で、求めたい変数を設計変数、満たすべき条件を制約条件、指標とする関数を目的関数と呼ぶ。Table.4.1 はそれぞれの条件を基礎式で表したものである。設

Table. 4.1: 最適設計問題

設計変数	$x = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T$
制約条件	$g_j(x) \leq 0, x_i^L \leq x_i \leq x_i^U$
目的関数	$F(x)$

Table. 4.2: 設定した条件

設計変数	数理モデルに含まれる未決定変数
制約条件	未決定変数とりうる範囲, C_i^{calc} の下限
目的関数	$F(x) = \sum_{i=1}^N (C_i^{exp} - C_i^{calc})^2$

計変数 x_i は連続変数, 目的関数 $F(x)$ および制約条件 $g_j(x)$ は x_i の非線形関数と仮定する.

本研究では最適設計問題の一種である非線形計画法を利用した変数決定法を提案する. トレーサー試験結果を最も精度よく再現可能な数理モデルの変数条件を求める最適設計問題と設定し, Table.4.2 のように設計変数・制約条件・目的関数を定義した. 設計変数は数理モデルに含まれる未決定変数, 制約条件を未決定変数の存在範囲および濃度の下限とした. 目的関数は, トレーサー試験結果と数値計算結果の誤差と設定した. 誤差の定義は式 (4.1) とした.

$$F(x) = \sum_{i=1}^N (C_i^{exp} - C_i^{calc})^2, \quad (i = 1, 2, 3, \dots, N) \quad (4.1)$$

C_i^{exp} はトレーサー試験より得られた観測値, C_i^{calc} は数理モデルより得られた計算結果, N は観測値のデータ数である. 各点で得られた計算結果と元データの誤差を二乗したものの総和を最小とする変数を求める.

変数決定プログラムのフローチャートを Fig.4.1 に示す. まず, 任意に設定した初期値を利用して数理モデルから解を取得する. 得られた解とトレーサーの観測値から目的関数

を計算し、変数探索プログラムから目的関数を小さくできる変数の方向を求めて変数を推定する。これを、推定される変数値の変位が十分に小さくなるまで繰り返す。なお、変数探索部分の計算には Vanderplaats らによる ADS(Automated Design Synthesis) [3, 4] を使用した。変数推定時における計算結果の変化する様子を Fig.4.2 に示す。任意の初期値から始まった計算は、変数を調整しながら目標値へと収束する。

解析対象とするトレーサー観測値には、ある時刻でのトレーサーの空間分布情報とある地点でのトレーサー応答の時間変化情報の2種類を設定した。次節では設定した観測値それぞれについて変数決定を行う。

4.3 トレーサーの空間分布を利用した変数の推定

4.3.1 数理モデルと計算条件

トレーサーの空間的な分布状況を利用した変数決定方法を開発した。物質輸送を規定する数理モデルは式(4.2)に示す移流拡散方程式とした。本節では、式(4.2)より求めたトレーサー分布曲線を目標値として解析を行った。

$$\frac{\partial C}{\partial t} + b \frac{\partial^\gamma C}{\partial t^\gamma} + \frac{\partial^\beta C}{\partial t^\beta} = -\frac{\partial C}{\partial X} + \frac{1}{Pe} \frac{\partial}{\partial X} \left(\frac{\partial^\alpha C}{\partial X^\alpha} \right), \quad (4.2)$$

初期条件・境界条件は次のように設定した。

$$\begin{aligned} t = 0, C &= 0, \\ X = 0, C &= 1.0, \\ X \rightarrow \infty, C &\rightarrow 0. \end{aligned} \quad (4.3)$$

数理モデルの計算条件は以下のとおりである。

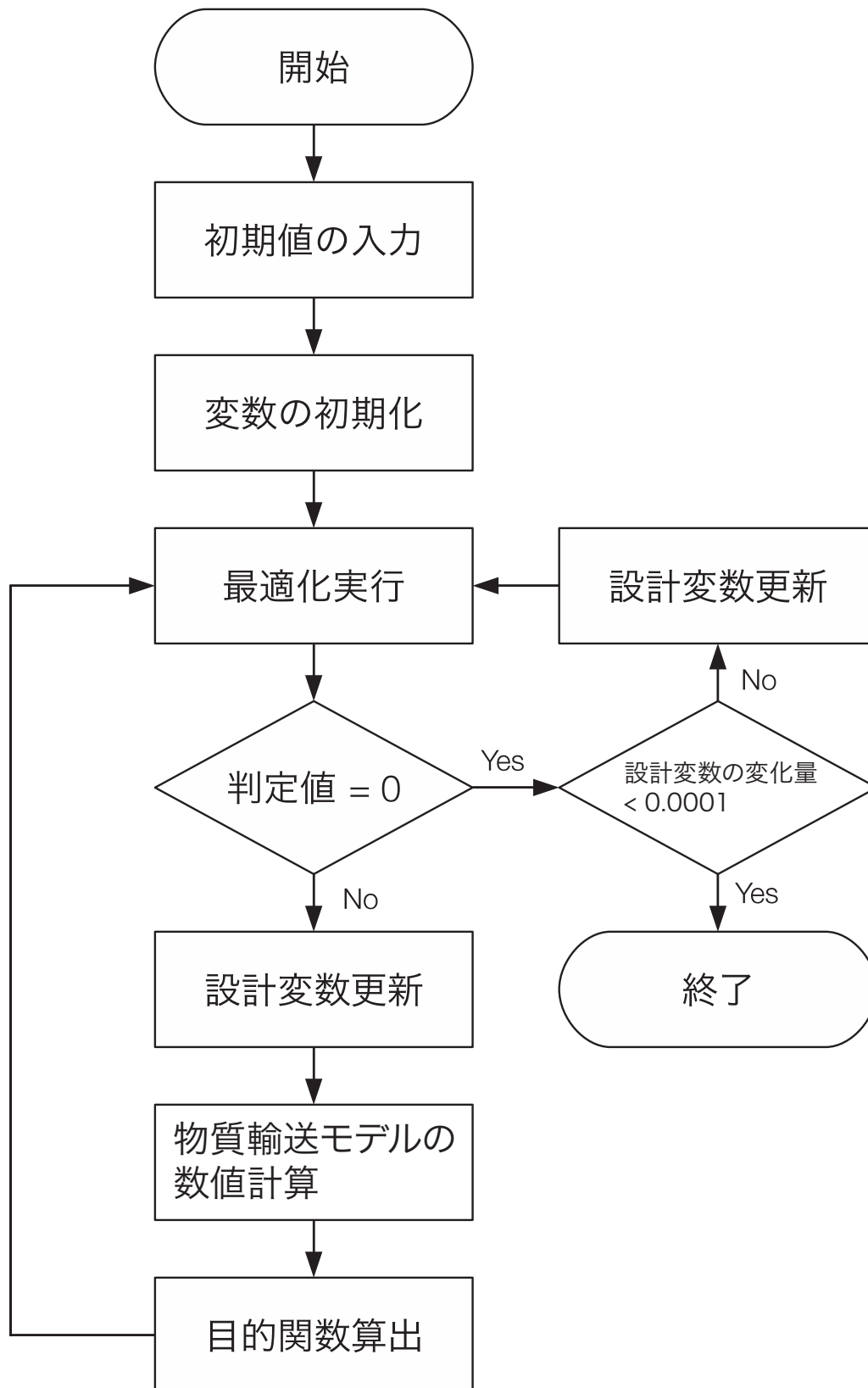


Fig. 4.1: 変数決定の流れ

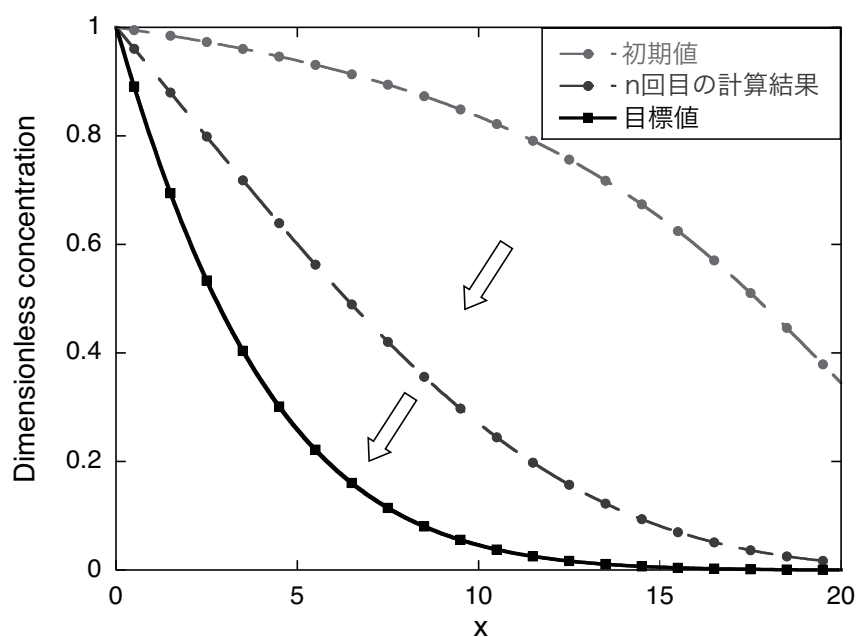


Fig. 4.2: 計算の進行によるグラフの変化

Table. 4.3: 数理モデルの計算条件

変数	数値
距離: X	100
時間: t	100
距離の分割数: N_x	1000
時間の分割数: N_t	10000
トレーサー投入時間: t_{in}	100.0
微分係数: α	1.0
微分係数: β	0.3
微分係数: γ	0.8
係数: b	0.8
ペクレ数: Pe	10

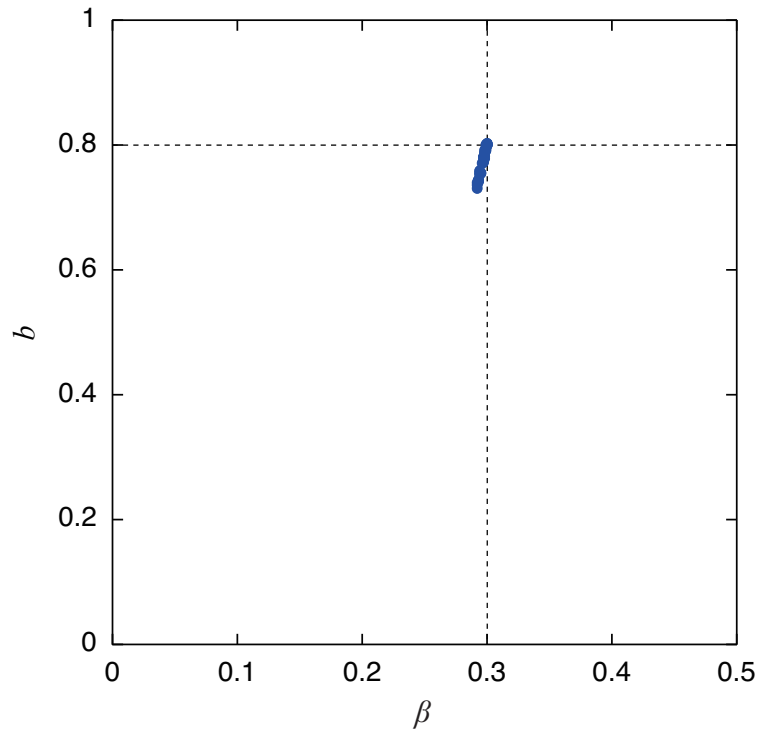


Fig. 4.3: $(\beta, b) = (0.3, 0.8)$ を目標値とした場合における収束結果の分布

4.3.2 2変数での解析

式(4.2)に存在する時間微分項の微分係数 β と時間微分項につく係数 b の2つを未決定変数と仮定して、変数を推定した。目標値にはTable.4.3に示す条件より計算された式(4.2)の $t = 10$ における濃度分布曲線を利用した。任意に設定した50通りの変数について解析を行った。変数の推定結果は以下の通りである。推定された変数の分布をFig.4.3に示す。ここから確認できるように、変数の初期値によらずおおむね目標値に収束できていることが確認できる。決定された変数のうち目的関数が最小のもの、最大のもの、中央値に近いものによる計算結果と目標値として設定した濃度分布曲線をあわせてFig.4.5に示す。いずれの場合も、推定された変数は目標値となった濃度分布曲線とよく一致していることが確認できる。目的関数が最大の場合にも計算結果は目標値から大きく外れることはなく、良好な推定結果が得られている。

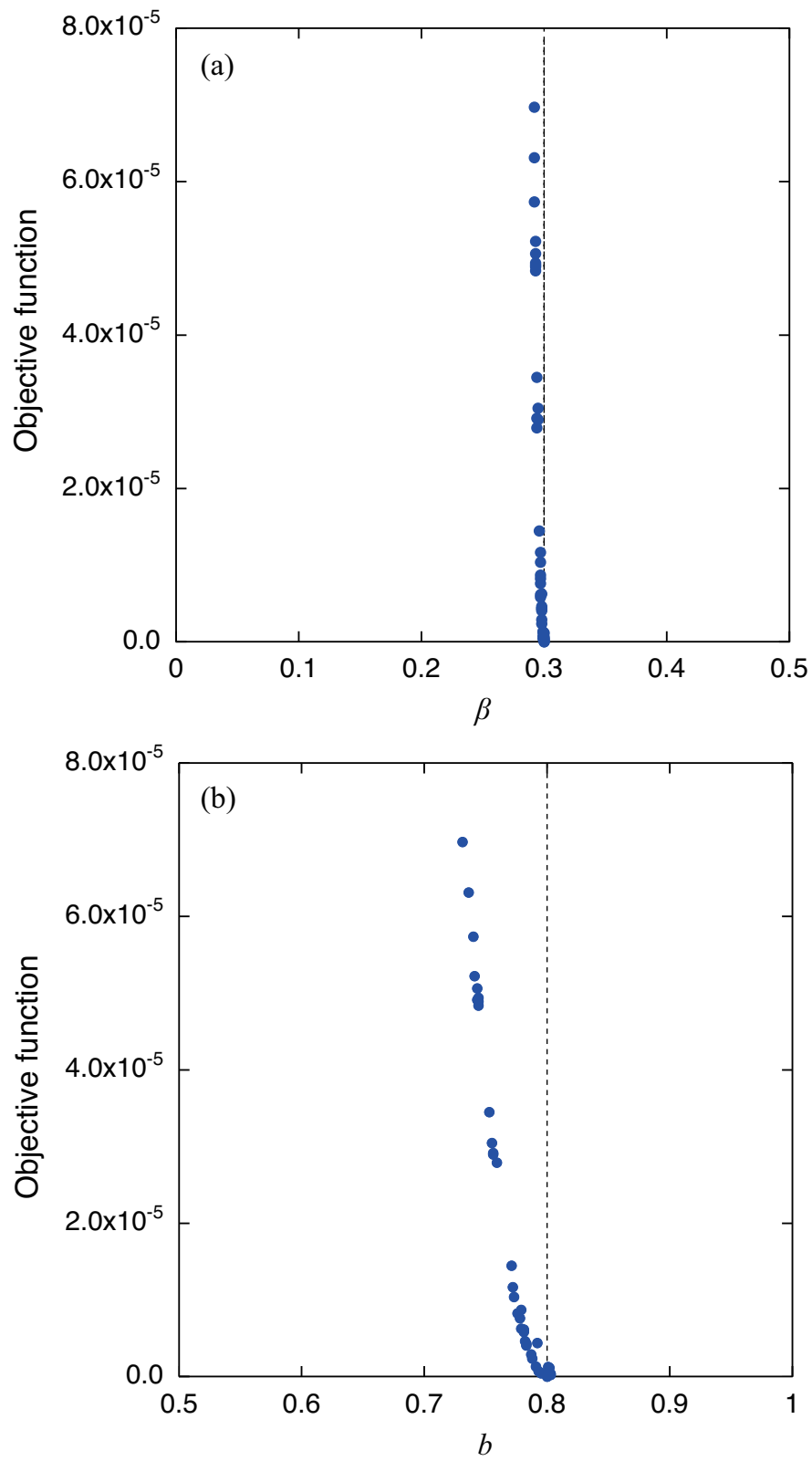


Fig. 4.4: 推定された変数と目的関数の関係：(a) β について (b) b について

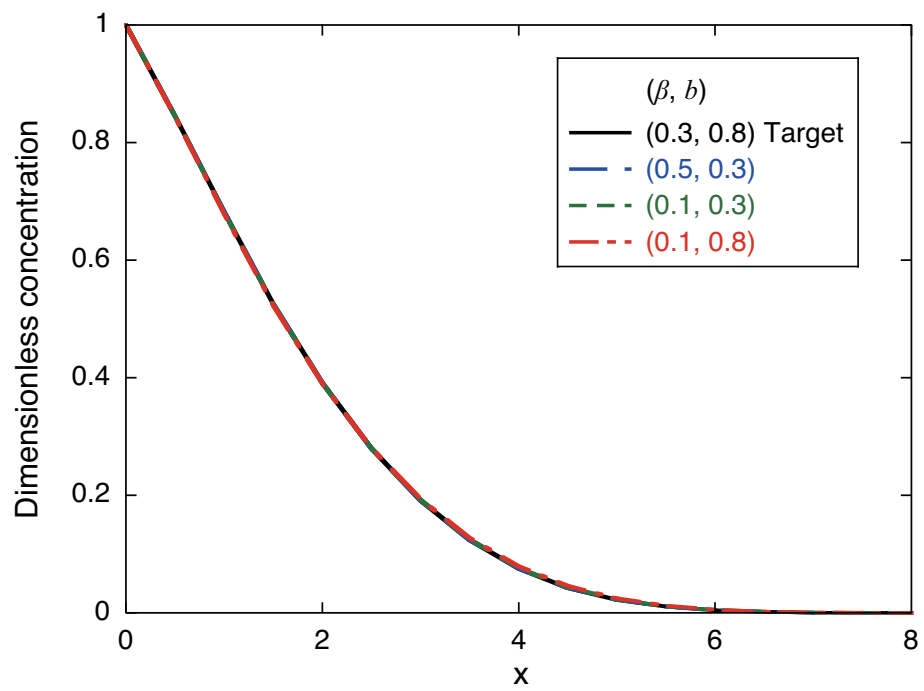


Fig. 4.5: 変数の組み合わせが (β, b) であるときの収束例

4.3.3 3変数での解析

4.3.3.1 組み合わせ1

未決定変数を3種類とした解析を行い、変数決定法の妥当性を検討した。変数の組み合わせとして、時間微分項の微分係数を2つ有する組み合わせ (β, γ, b) と、空間微分項と時間微分項の微分係数を1つずつ有する組み合わせ (α, β, b) を設定した。前者を組み合わせ1、後者を組み合わせ2とする。

組み合わせ1に関して、105通りの初期値から解析を行った。Fig.4.6は初期値ごとに推定された変数の分布を示したものである。図中の点線は各変数の目標値を表しており、点線の交点に近いほどより目標値に近い値に収束していることを示している。Fig.4.6から、目標値付近に収束できている変数は微分係数 β のみであることがわかる。 b および時間微分項の微分係数 γ は β に比べて値のばらつきが大きく、目標値以外への収束も見られる。とくに γ は0から1まで幅広く値が分布していることが確認できる。

Fig.4.8は計算結果のうち、目的関数が最小となったもの、最大となったものと目標値からそれぞれ濃度分布曲線を描いたものである。Fig.4.8より、得られた変数から計算された濃度分布曲線はいずれも目標値に似通った減少傾向をしめす曲線となっている。しかしながら、2変数の場合とは異なり目的関数が最大となる場合の計算結果が目標値から目立った形で外れていることが確認できる。Fig.4.7は推定された変数値と目的関数の関係を示したものである。図中の点線は目標値である。いずれの変数も、目標値付近で目的関数が最小となることが確認できる。

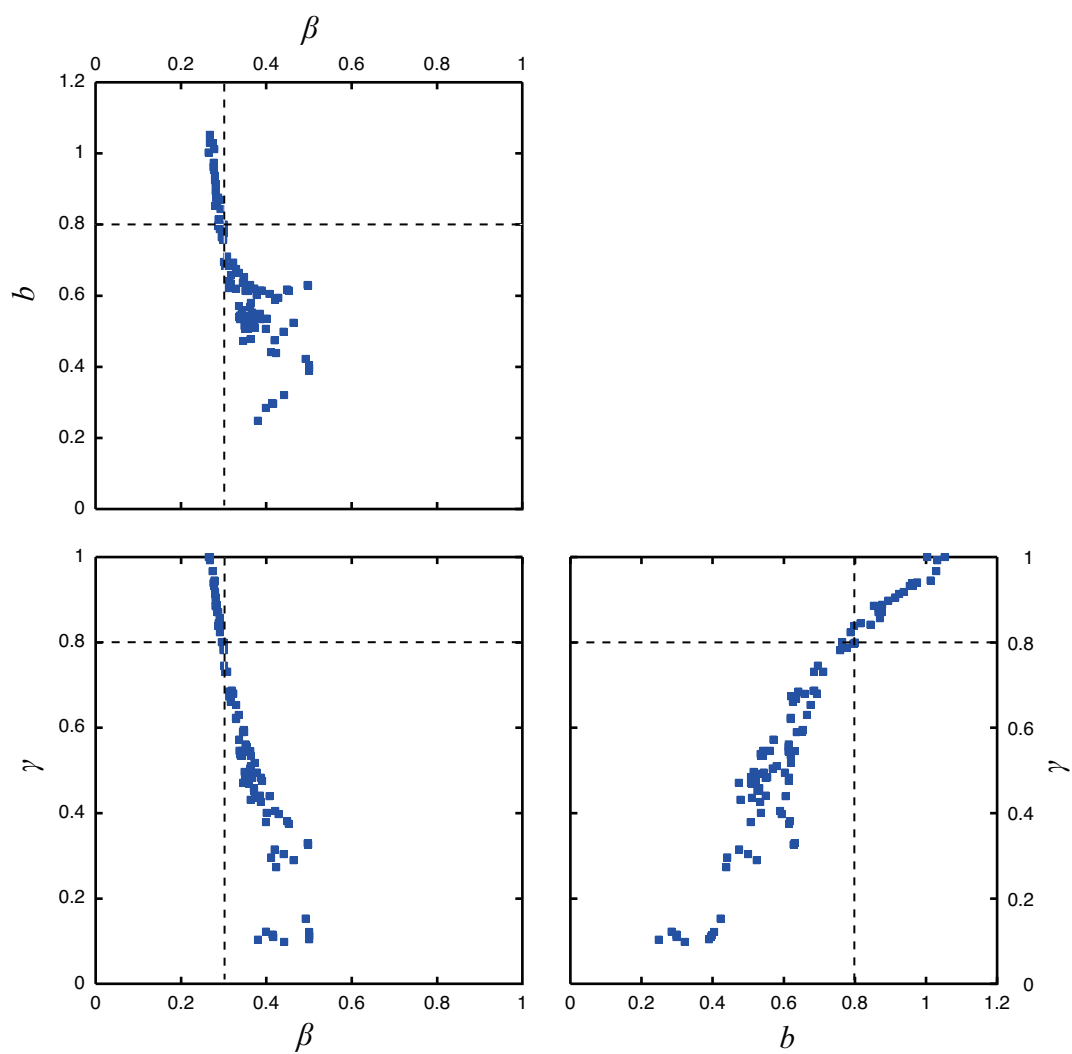


Fig. 4.6: $(\beta, \gamma, b) = (0.3, 0.8, 0.8)$ を目標値とした場合における収束結果の分布

第4章 パラメータ決定法の考案

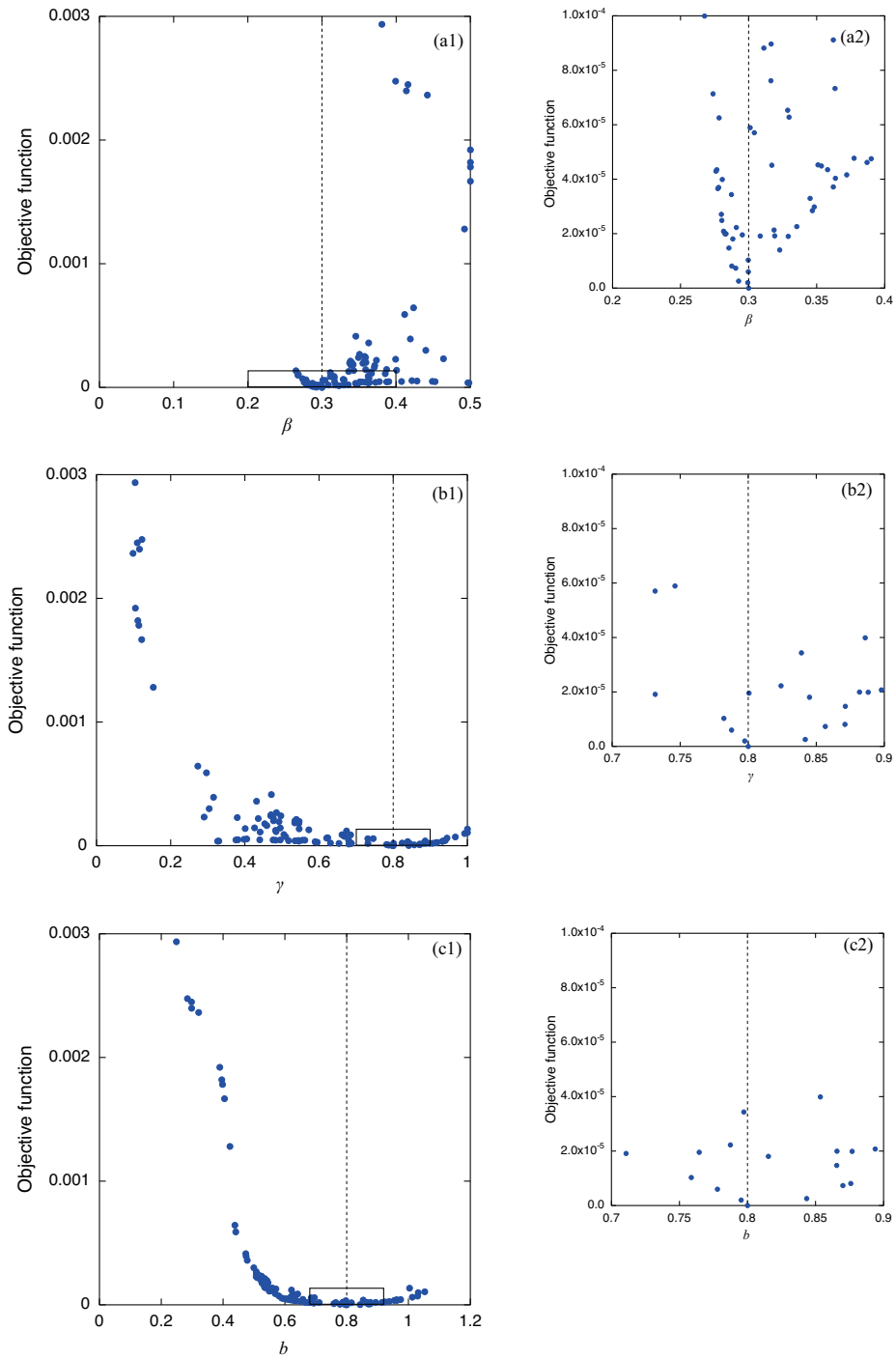


Fig. 4.7: 推定された変数と目的関数の関係： (a1),(a2) β について (b1),(b2) γ について (c1),(c2) b について

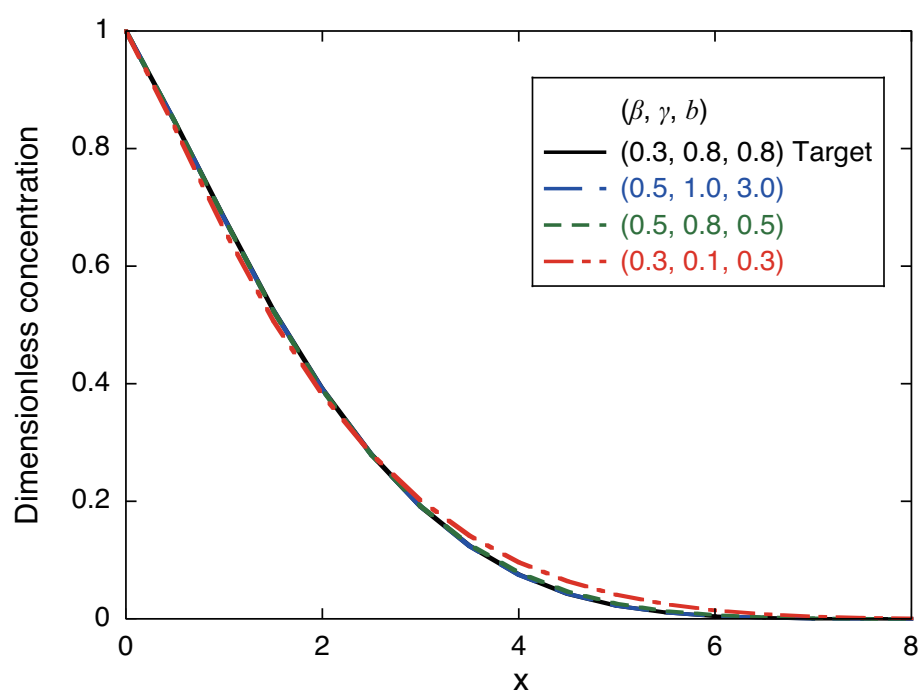


Fig. 4.8: 組み合わせが (β, γ, b) であるときの収束例

4.3.3.2 組み合わせ2

組み合わせ2では133通りの初期値から解析を行った。初期値ごとに推定された変数の分布を Fig.4.9 に示す。図中の点線は各変数の目標値である。推定された変数のうち、時間微分項の微分係数 γ の収束性が最も高く、次いで b となる。空間微分項の微分係数 α の収束性は最も低く、値の存在可能な範囲全体に分布している。

Fig.4.10 は推定された変数ごとに目的関数との関係を示したものである。収束性の高い変数 γ は目標値付近での目的関数が最小となっている。収束性の低い変数 α , b についてもおよそ目標値付近の目的関数が低い値を示していることがわかる。Fig.4.11 は組み合わせ1と同様に、計算結果のうち、目的関数が最小となったもの、最大となったものと目標値からそれぞれ濃度分布曲線を描いたものである。こちらも、推定された変数から得られる濃度分布曲線は目標値と同様の減少傾向を示している。目的関数が最大となる条件では、組み合わせ1より目立たないものの、目標値から外れた曲線を描いている。

組み合わせ1、組み合わせ2の結果から確認できるように、未決定変数が3つとなる場合は2変数の場合よりも推定結果のばらつきが大きくなる。したがって、この結果のみで変数を一意に決定することが困難となる場合も考えられる。一方、未決定変数が2つの場合は良好な推定結果を示している。そのため、3変数での解析より得られた変数のうち、収束性の良好なものを固定したうえで残りの2変数で再度解析することで良好な結果を得ることが可能であると考えられる。

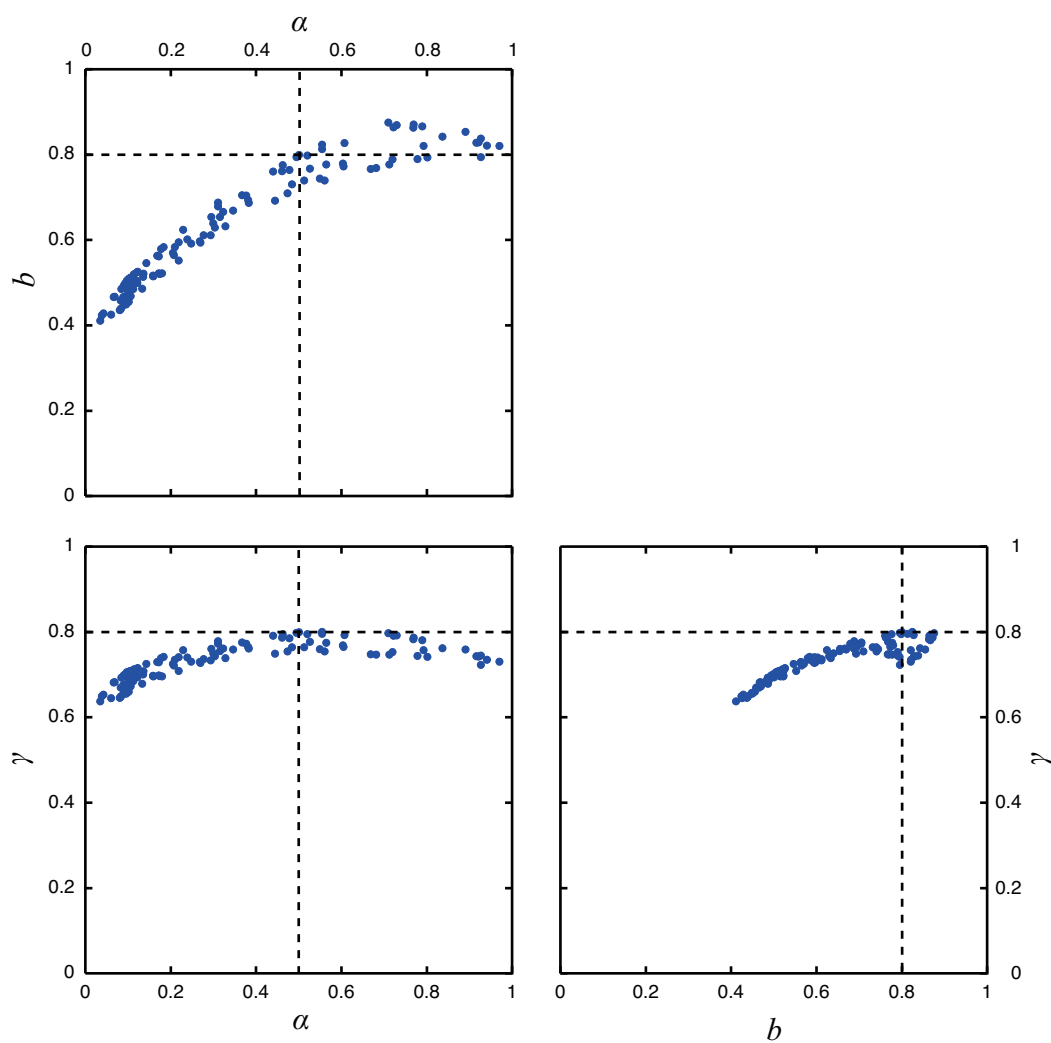


Fig. 4.9: $(\alpha, \gamma, b) = (0.5, 0.8, 0.8)$ を目標値とした場合における収束結果の分布

第4章 パラメータ決定法の考案

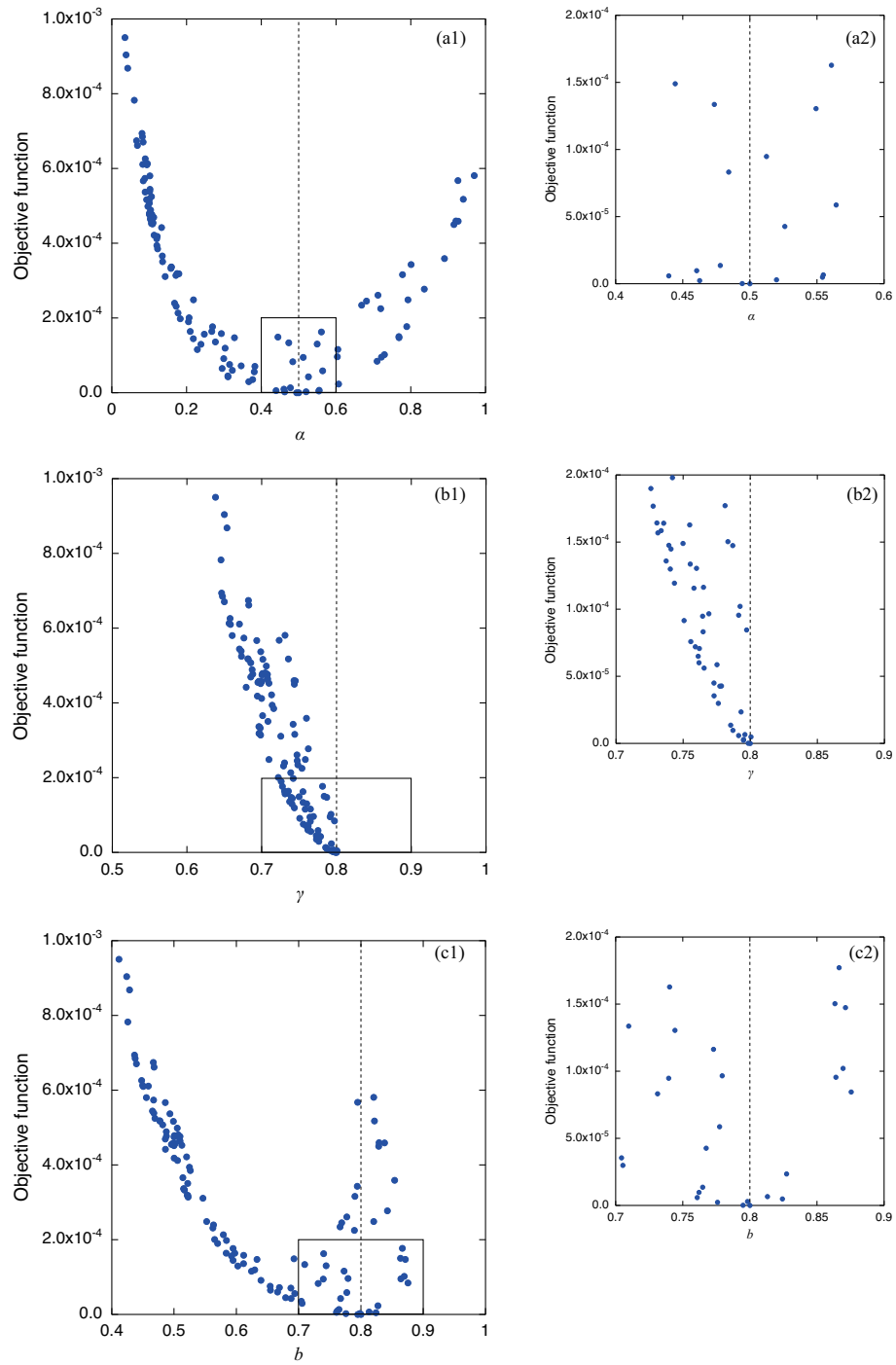


Fig. 4.10: 推定された変数と目的関数の関係： (a1),(a2) α について (b1),(b2) γ について (c1),(c2) b について

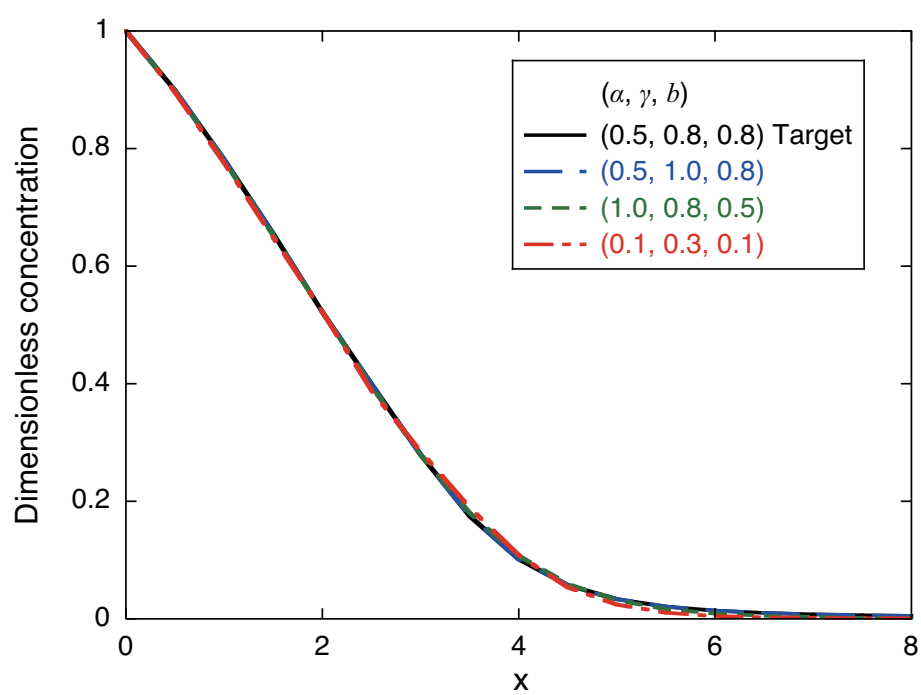


Fig. 4.11: 組み合わせが (α, γ, b) であるときの収束例

4.4 トレーサー応答曲線から行う変数の決定

4.4.1 数理モデルと計算条件

トレーサー試験から得られる時間応答を利用して、変数の推定を行った。使用する数理モデルは式(4.4)のとおりである..

$$\frac{\partial C}{\partial t} + b \frac{\partial \gamma C}{\partial t \gamma} + \frac{\partial \beta C}{\partial t \beta} = -\frac{\partial C}{\partial X} + \frac{1}{Pe} \frac{\partial}{\partial X} \left(\frac{\partial^\alpha C}{\partial X^\alpha} \right), \quad (4.4)$$

初期条件・境界条件は以下の通りである。トレーサー試験を想定した計算条件として、 $C_0(t)$ は式(4.6)の通りとした。

$$\begin{aligned} t = 0, C &= 0, \\ X = 0, C &= C_0(t), \\ X \rightarrow \infty, C &\rightarrow 0. \end{aligned} \quad (4.5)$$

$$\begin{aligned} C_0(t) &= 1 \quad (0 < t \leq 1) \\ C_0(t) &= 0 \quad (1 < t) \end{aligned} \quad (4.6)$$

4.4.2 2変数での解析

式(4.4)の $x = 4$ でのトレーサー応答曲線を目標値、係数 b と微分係数 γ を未決定変数として変数を推定した。数理モデルの計算条件は Table.4.4 とし、220通りの初期値について解析を行った。

収束した変数の分布は Fig.4.12 の通りである。図中の点線は目標値を表し、点線の交点が目標値を示している。どの計算結果もほぼ一様に目標値に収束できていることがわかる。このときの変数と目的関数の関係を Fig.4.13 に示す。どちらの変数においても、目的関数の値によらず目標値に収束していることが確認できる。

Table. 4.4: 数理モデルの計算条件

変数	数値
距離: X	100
時間: t	100
距離の分割数: N_x	1000
時間の分割数: N_t	10000
トレーサー投入時間: t_{in}	1.0
微分係数: α	1.0
微分係数: β	0.6
微分係数: γ	0.7
係数: b	1.5
ペクレ数: Pe	10

Fig.4.14 は目的関数が最大するとき, 最小するとき, 中央付近の値となったときに決定された変数による計算結果と目標値を比較したものである. いずれの場合もよく一致した結果となっていることが確認できる.

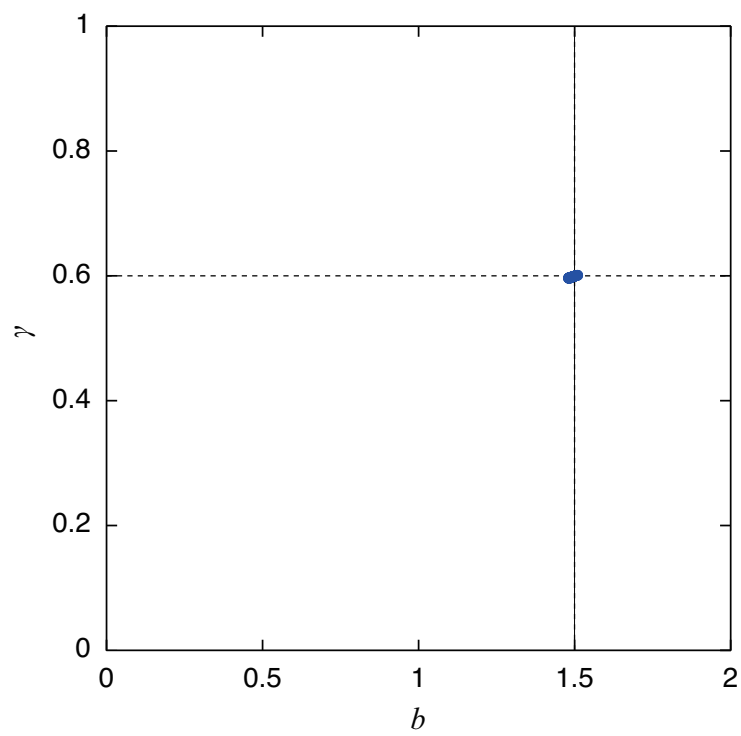


Fig. 4.12: $(\gamma, b) = (0.6, 1.5)$ を目標値とした場合における収束結果の分布

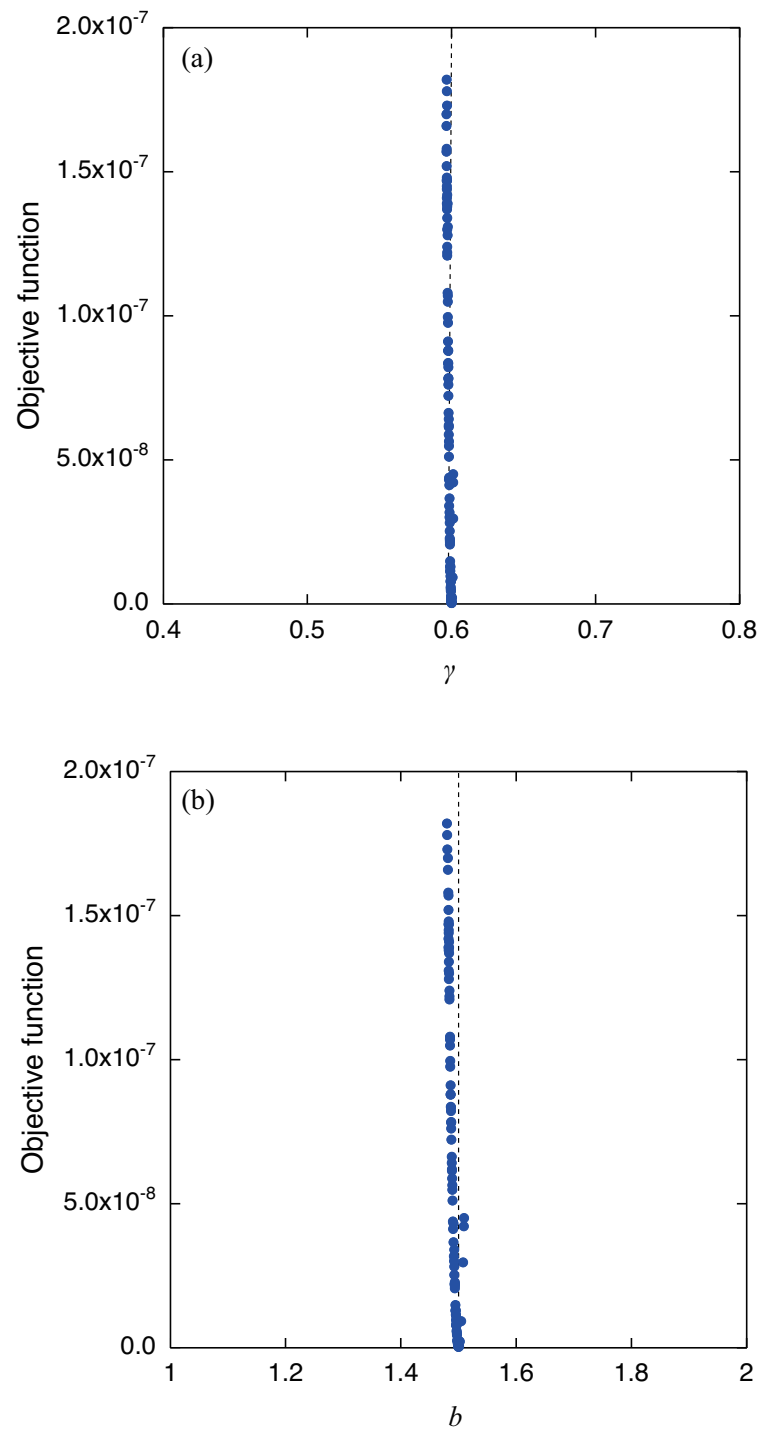


Fig. 4.13: 推定された変数と目的関数の関係： (a) γ について (b) b について

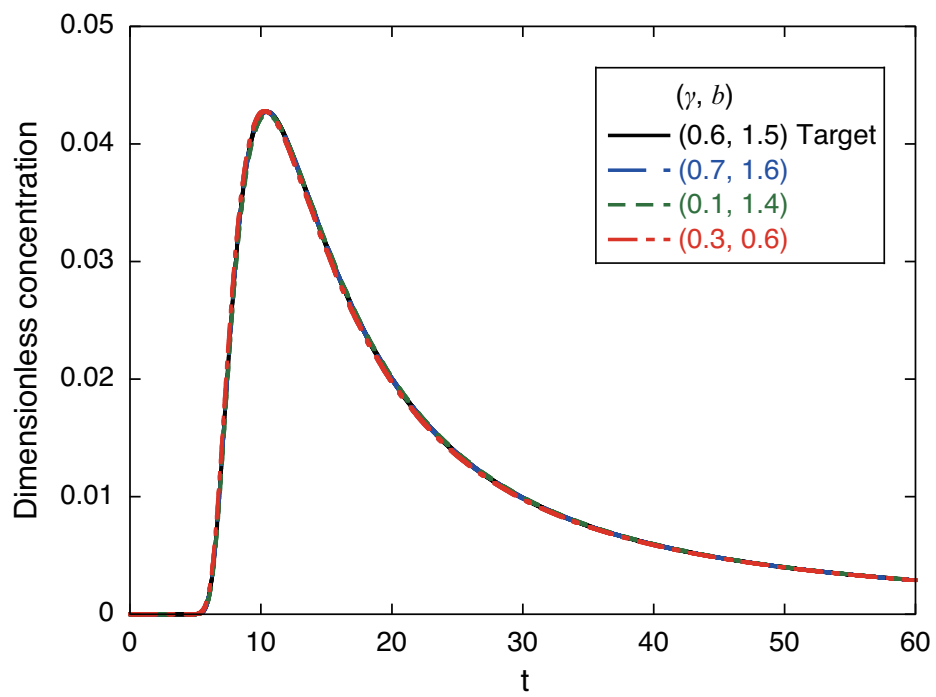


Fig. 4.14: 組み合わせが (γ, b) であるときの収束例

4.4.3 3変数での解析

63 ページの式 (4.4) に含まれる変数 b , 微分係数 β , γ を未決定変数として変数を推定した. 目標値には Table.4.5 に示す計算条件より得られた $x = 4$ でのトレーサー応答を設定した.

Table. 4.5: 数理モデルの計算条件

変数	数値
距離: X	100
時間: t	100
距離の分割数: N_x	1000
時間の分割数: N_t	10000
トレーサー投入時間: t_{in}	1.0
微分係数: α	1.0
微分係数: β	0.5
微分係数: γ	0.6
係数: b	0.7
ペクレ数: Pe	10

収束した変数の分布を Fig.4.15 に示す. 図中の点線は目標値を示している. 推定された変数のうち b が最も収束性が高く, β , γ の順に収束性が落ちている. トレーサー濃度分布を利用した推定結果と同様に, 2 変数に比べて 3 変数では推定された変数のばらつきが大きくなっている.

Fig.4.16 はそれぞれの変数と目的関数の関係を示したグラフである. いずれの変数も, 目標値付近で目的関数が最小となっている. また, Fig.4.16 より微分係数 β と γ が目的関数の高い変数値に収束している計算結果の存在が確認できる. これは変数が局所的な最小

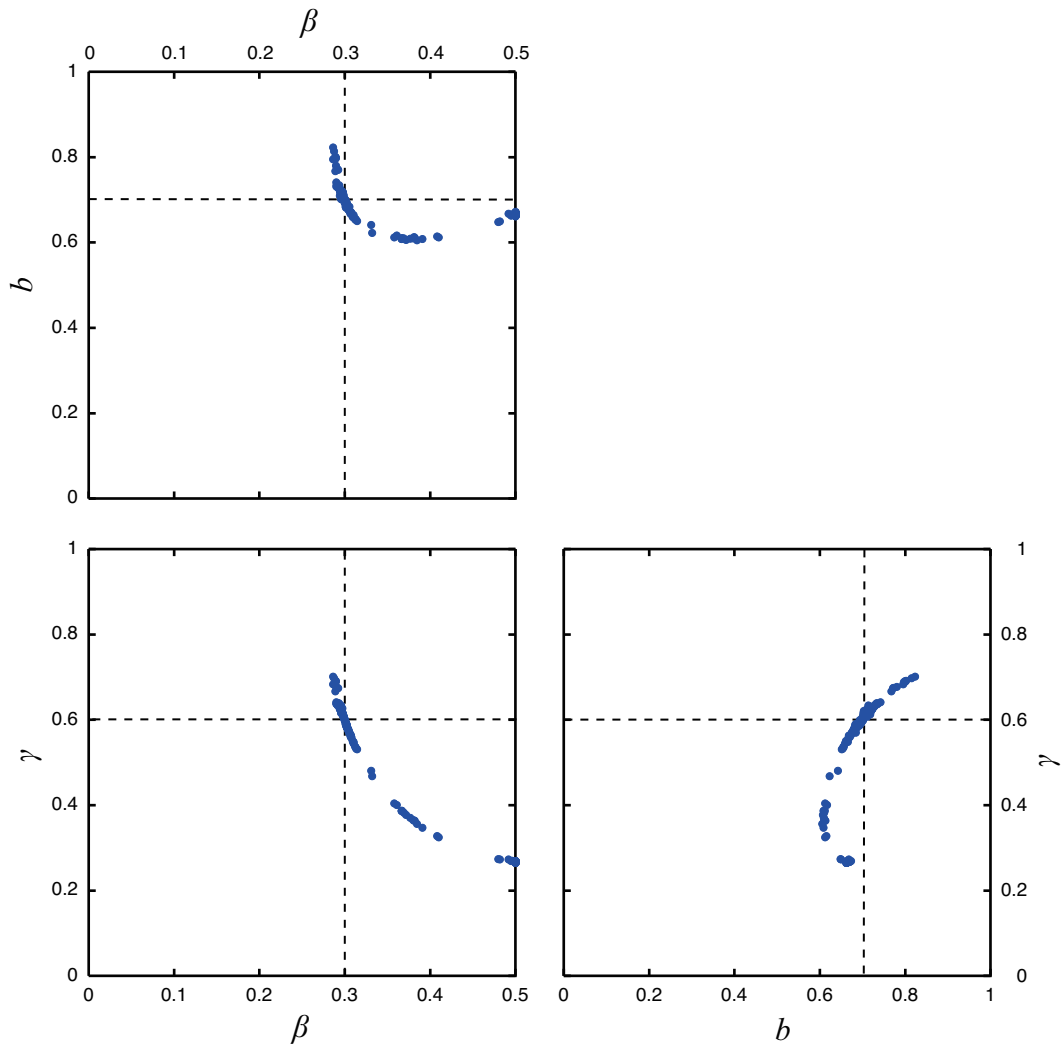


Fig. 4.15: $(\beta, \gamma, b) = (0.3, 0.6, 0.7)$ を目標値とした場合における収束結果の分布

値に収束した結果であると考えられる。3章の結果より、微分係数 β と γ が物質輸送に及ぼす影響は同一である。そのため、 β と γ の値によっては最適値が一意とならない可能性が存在する。したがって、これら双方が未決定変数となる場合の解析には慎重な解析が必要となる。Fig.4.17 は目的関数が最大するとき、最小のとき、中央付近の値となったときに決定された変数による計算結果と目標値となった応答曲線を比較したものである。目的関数が最大となる場合以外はおおむね目標値を満足する計算結果が得られている。

第4章 パラメータ決定法の考案

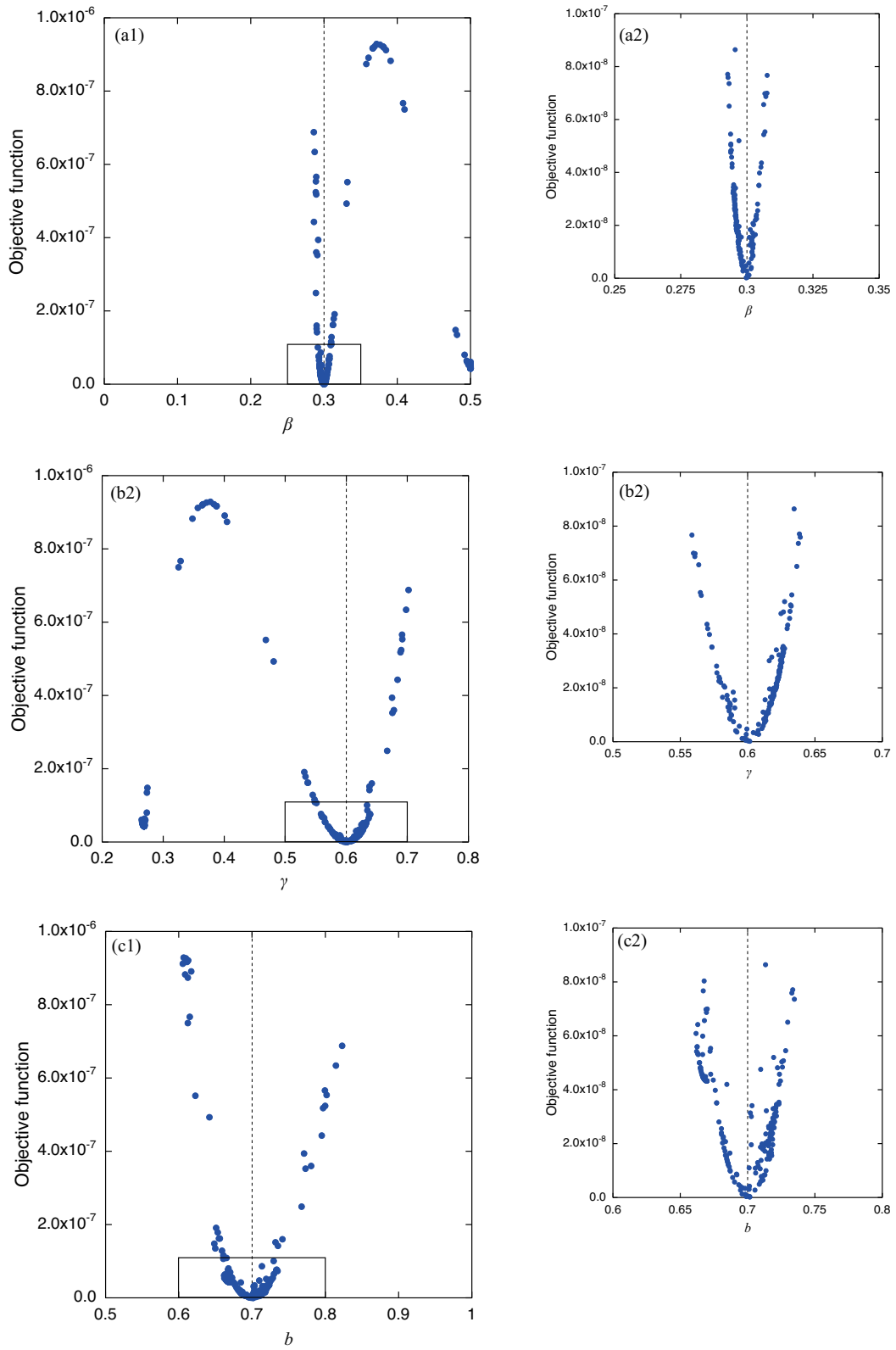


Fig. 4.16: 推定された変数と目的関数の関係：(a1),(a2) β について，(b1),(b2) γ について，(c1),(c2) b について．

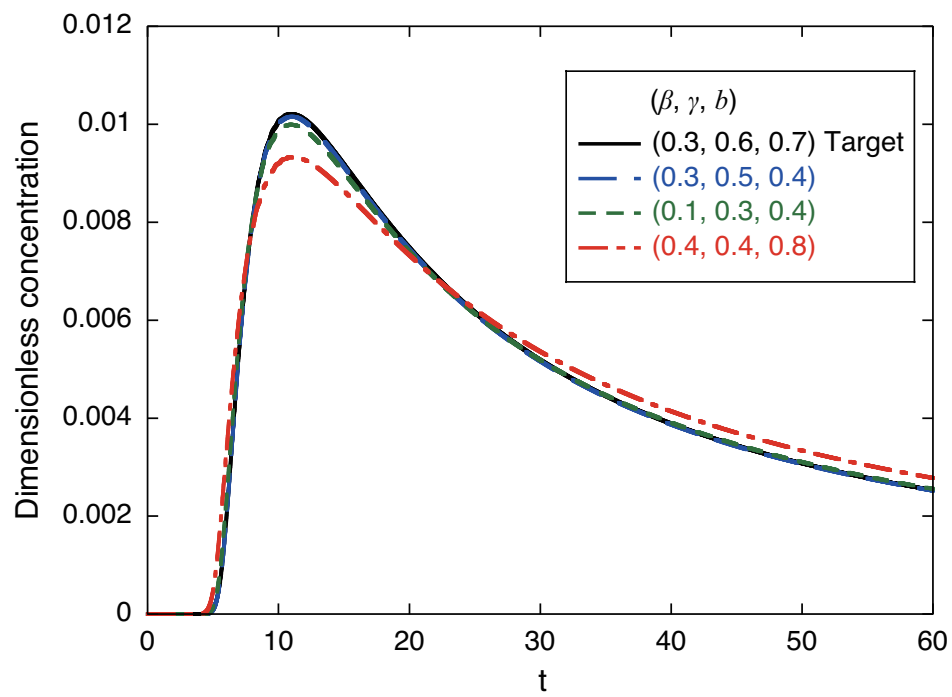


Fig. 4.17: 組み合わせが (β, γ, b) であるときの収束例

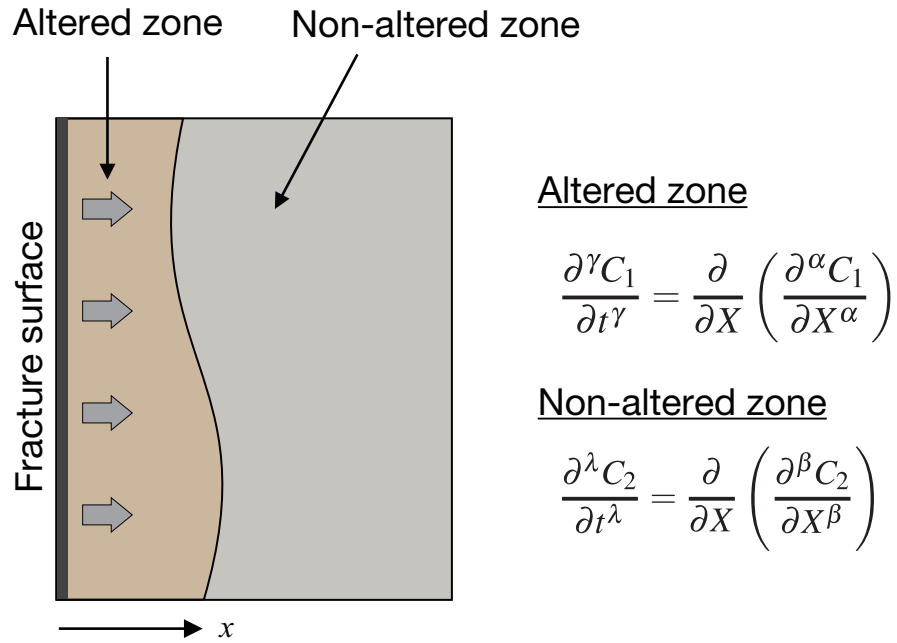


Fig. 4.18: 変質層を有する岩石の概念

4.5 トレーサー観測値を使用した変数決定法の検証

開発した変数決定法を使用して、実際のトレーサー観測値から変数の推定を試みた。本節では、Yamamoto らによる岩石の Thermoluminescence(TL) 強度より推定したトレーサー分布を使用して変数推定を行った [5, 6]。岩石の概念図を Fig.4.18 に示す。岩石は熱水の影響によってき裂面近傍が変質している。そのため、未変質領域に比べて空隙率が上昇している。岩石上で生じる物質輸送を拡散のみと仮定すると、方程式は変質層、未変質層それぞれについて次の方程式で表される。本研究では変質層の変数を固定して未変質層のみを対象として変数を推定した [7, 8]。

$$\frac{\partial^\gamma C_1}{\partial t^\gamma} = \frac{\partial}{\partial X} \left(\frac{\partial^\alpha C_1}{\partial X^\alpha} \right). \quad (4.7)$$

$$\frac{\partial^\lambda C_2}{\partial t^\lambda} = \frac{\partial}{\partial X} \left(\frac{\partial^\beta C_2}{\partial X^\beta} \right). \quad (4.8)$$

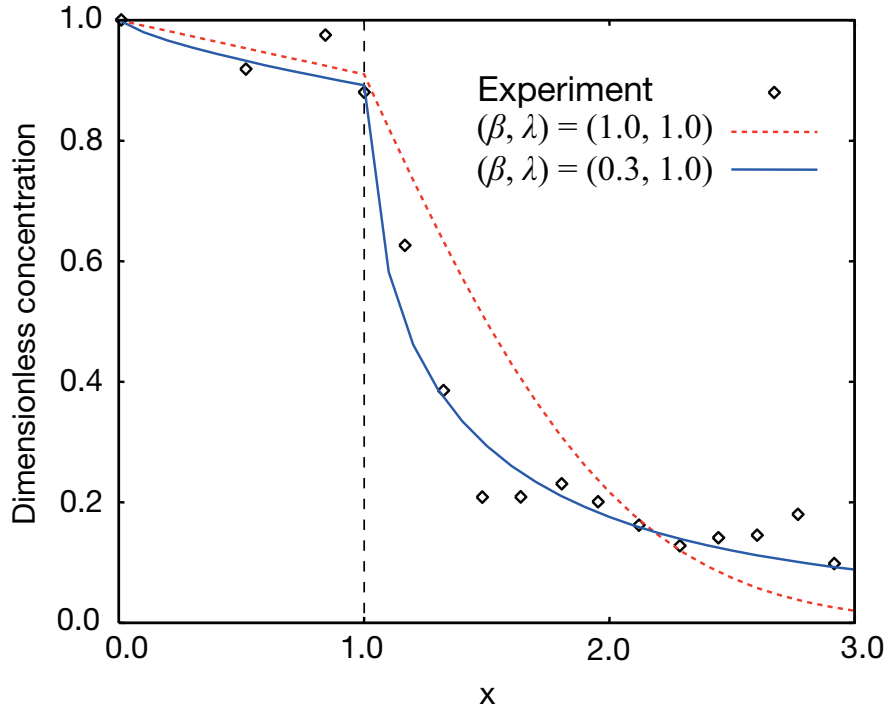


Fig. 4.19: 推定された濃度分布

$$X = 0, C_1 = C_0,$$

$$t = 0, C_1 = C_2 = 0, \quad (4.9)$$

$$X = 1, C_1 = C_2,$$

$$X \rightarrow \infty, C_2 \rightarrow 0.$$

計算結果を Fig.4.19 の通りである。点線は TL 強度から推定されるトレーサーの濃度分布，実線は推定された変数による推定結果である。式 (4.7) の変数 α ， γ はそれぞれ 0.7, 0.3 で固定した。Fig.4.19 より，未変質層のみではあるものの推定された結果は観測値を良く一致していることが確認できる。これにより，観測されたトレーサー濃度分布を利用して数理モデルの変数を推定することで，当該地域の物質輸送を推定することが可能であることが示唆された。

4.6 結言

本章では、トレーサー試験の観測値から物質輸送数理モデルの変数を合理的に決定する方法として、非線形計画法を利用した変数決定手法を提案した。以下に本章で得られた知見を述べる。

1. 数理モデルに含まれる複数の未決定変数の合理的な決定法として、非線形計画法を利用した変数決定法を提案した。2種類のトレーサー観測値から、変数の推定を行うことが可能である。
2. 未決定変数を2種類とした解析では、初期値の組み合わせによらず決定された変数は目標値との差が十分に小さいものであった。
3. 未決定変数を3種類とした解析では、いずれの変数も目標値への収束性が低下した。そのため、収束性の良い変数を固定したうえで再度2変数での解析を行うことで推定制度の向上が見込まれる。
4. 実際に観測されたトレーサー情報を使用して物質輸送数理モデルの変数推定を行ったところ、測定値を満足する計算結果となる変数を推定することができた。これにより、観測されたトレーサー濃度分布を利用して数理モデルの変数を推定することで、当該地域の物質輸送を推定することが可能であることが示唆された。

参考文献

- [1] Jorge Nocedal and Stephen J. Wright. *Numerical Optimization*. Springer Series in Operations Research. Springer, Second edition, 2006.
- [2] 矢部博. 工学基礎 最適化とその応用. 新・工科系の数学. 数理工学社, 2006.
- [3] Garret N. Vanderplaats and Hiroyuki Sugimoto. A general-purpose optimization program for engineering design. *Computers and Structures*, Vol. 24, No. 1, pp. 13–21, 1986.
- [4] G. N. Vanderplaats. *ADS - A FORTRAN PROGRAM FOR AUTOMATED DESIGN SYNTHESIS VERSION 3.00*. ENGINEERING DESIGN OPTIMIZATION, INC., CA, March 1988.
- [5] Noriyoshi Tsuchiya, Toshifumi Suzuki, and Katsuto Nakatsuka. Thermoluminescence as a new research tool for the evaluation of geothermal activity of the Kakkonda geothermal system, northeast Japan. *Geothermics*, Vol. 29, pp. 27–50, 2000.
- [6] Makoto Yamamoto and Noriyoshi Tsuchiya. Application of TL as a geothermal sensor. *Radiation Protection Dosimetry*, Vol. 119, No. 1-4, pp. 119–123, April 2006.
- [7] Sergei A. Fomin and Vladimir A. Chugunov. *Mathematical Modeling of Mass Transport in Complex Media*, Vol. 7 of *The 21st Century COE Program International COE of Flow Dynamics Lecture Series*. Tohoku University Press, Sendai, Japan, October 2007.
- [8] Ryuichi Chiba, Sergei Fomin, Vladimir Chugunov, Toru Takahashi, Yuichi Niibori, and Toshiyuki Hashida. Numerical simulation for non-fickian diffusion into fractured porous rock. In *AIP Conference Proceedings*, Vol. 833, pp. 133–139, New York, 2006. American Institute of Physics.

第5章 長期温度変化挙動推定への応用

5.1 緒言

前章までに、トレーサー試験の結果から当該地域の物質輸送を規定する複雑流動パラメータを取得する流れを構築した。これにより、得られた複雑流動パラメータに基づいた数値計算によってその地域での長期的な物質輸送の推定が可能となる。そのため、放射性核種の長期移行挙動解析への展開が期待される。

本章では適切な還元井設置へ Fig.5.1 に地熱貯留層に対する還元概念を示す。還元井の設置による貯留層の人工的涵養は、米国 The Geysers 地熱地域で低下していた蒸気生産量の再生をもたらした事例が知られている [1, 2]。以降、多くの地熱地域では貯留層の涵養を目的として熱水の還元が行われている。しかしながら、低温水の流入による貯留層温度の低下を引き起こす可能性もしてきされているため、還元井配置は慎重に検討されている [3-7]。本研究で提示する概念によって観測地点での温度変化を推定することが可能となれば、持続可能な地熱抽出が可能な還元井の選定に新たな知見を与えるものと期待される。

本章では前章までで提示した数理モデルと変数推定法を利用した数値計算から、長期にわたる物質輸送と温度変化の推定法を提案する。ここでは、前章までに提示した変数推定方法を利用して得られた変数から物質輸送を予測し、温度変化を見積もる方法論を提示する。

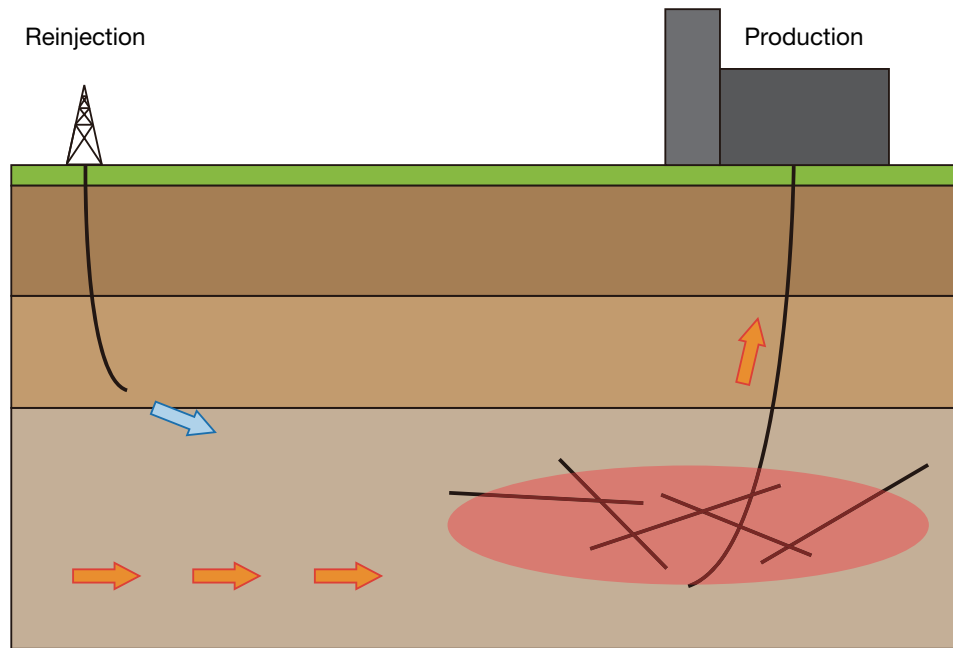


Fig. 5.1: 地熱貯留層に対する熱水の還元

5.2 トレーサー応答を利用した温度変化の推定

5.2.1 温度変化推定モデル

熱は液相・固相双方を移動するために、流体よりも移動速度が小さくなることが知られている。そして、この熱的な遅延作用を考慮しながら熱移動を推定する試みがなされている [8, 9]。ここでは、トレーサーの時間応答から温度変化を推定する数学モデルについて述べる。物質輸送を熱移動に換算するに当たっては、Shook [8] による流管の仮定を踏まえたモデルを利用した。流管の概念を Fig.5.2 に示す。帯水層には空隙率や長さの異なる流管が多数存在し、そのそれぞれを流体が移動すると仮定する。流管同士は独立で、他の流管を移動する流体が混ざることはない。一方、トレーサーは流管の他に流管の周辺に広がる領域にも移動する。流体の持つ熱についても同様に、流管およびその周辺領域を移動するものと仮定する。その概念図を Fig.5.3 に示す。なお帯水層では固相と液相の局所的

な熱平衡状態を仮定し、岩石物性値は場所によらず一定とした。流体は流管のみを移動するためにその速度 v_w はトレーサーの移動速度 v_m と熱の伝播速度 v_T に比べて十分に大きい。そのため、 v_w から見た場合 v_m と v_T はどちらも十分に小さい速度であると考えられる。固相と液相が熱平衡状態である仮定と、 v_w に比べて v_m および v_T が十分に小さいことから、トレーサーの到達量を温度の低下量として直接取り扱うものとする。これにより、トレーサー回収地点での無次元推定温度 T_p は次式で表すことができる。

$$T_p(t) = \frac{\int_0^t q(\tau)C(\tau)d\tau}{\int_0^\infty q(t)C(t)dt} \quad (5.1)$$

$q(t)$ は流量、 $C(t)$ は回収されたトレーサーの濃度である。式(5.1)から確認できるように、 T_p は0から1の範囲で値をとる無次元数である。 $T_p = 0$ が初期値となり、初期の岩体温度を表す。全てのトレーサーが淘汰すると $T_p = 1$ となり、回収される流体の温度は投入温度と等しくなる。また、熱の移動速度を反映させるため、岩石と流体の熱物性値と帯水層の空隙率による遅延係数を導入し次式のように到達時刻の遅延を定義した。

$$t^* = t(1 + D_T) = t \left(1 + \frac{(1 - \phi)\rho_r c_{pr}}{\phi \rho_w c_{pw}} \right) \quad (5.2)$$

c_{pr}, c_{pw} はそれぞれ岩石と流体の熱容量、 ρ_r, ρ_w は岩石と流体の密度、 ϕ は空隙率、 D_T は時刻の遅延係数を示している。

5.2.2 トレーサー応答による温度変化推定結果

前節で仮定した熱移動の定義を利用して、物質輸送数理モデルから得られるトレーサー応答から温度変化の推定を行った。トレーサー応答の数値計算には式(5.3)の移流拡散方程式を使用した。

$$\frac{\partial C}{\partial t} + b \frac{\partial \gamma C}{\partial t \gamma} + \frac{\partial \beta C}{\partial t \beta} = - \frac{\partial C}{\partial X} + \frac{1}{Pe} \frac{\partial}{\partial X} \left(\frac{\partial \alpha C}{\partial X \alpha} \right), \quad (5.3)$$

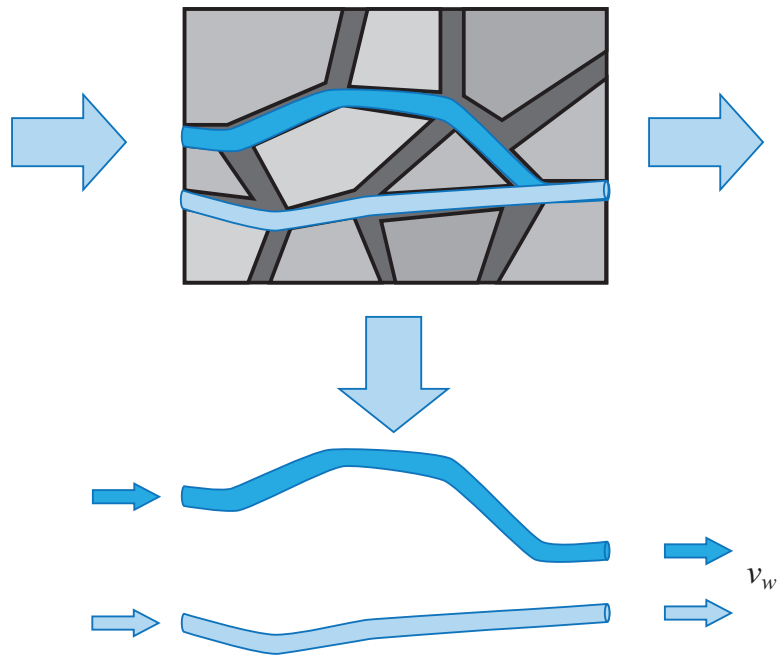


Fig. 5.2: 流管の概念

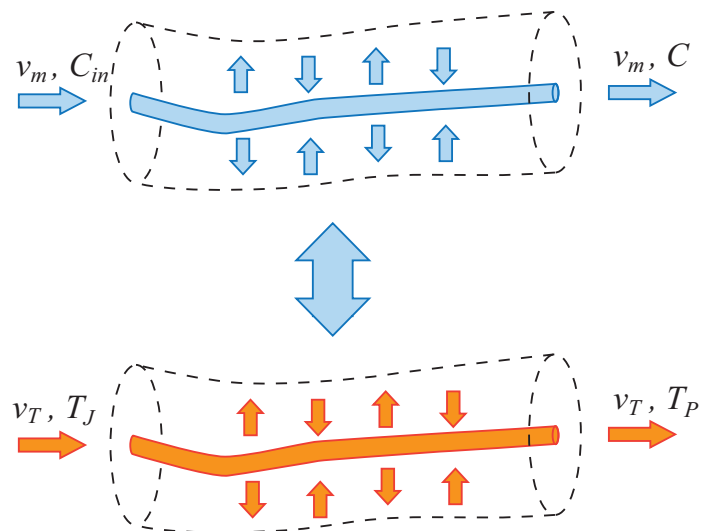


Fig. 5.3: 流管と流管周囲の物質輸送に基づいた熱移動の定義

Table. 5.1: 使用した物性値 [10]

名称	値
Initial temperature: T_i (°C)	300
Injection temperature: T_j (°C)	50
Density (rock): ρ_r (kg/m ³)	2.6×10^3
Density (fluid): ρ_w (kg/m ³)	1.0×10^3
Specific Heat (rock): c_{pr} (J/kg·K)	8.0×10^2
Specific Heat (fluid): c_{pw} (J/kg·K)	4.2×10^3
Porosity: ϕ	0.1
Fluid velocity: v (m/day)	10

境界条件・初期条件は次の通りである.

$$\begin{aligned}
 t = 0, C = 0; \\
 X = 0, C = C_0(t); \\
 X \rightarrow \infty, C \rightarrow 0.
 \end{aligned} \tag{5.4}$$

式 (5.1) および式 (5.2) の計算に必要な物性値は次の通り設定した. トレーサーの時間応答データを利用した温度推定結果を以下に示す. 式 (5.3) に存在する変数のうち時間微分項の微分係数 γ と時間微分項の影響を制御する係数 b をそれぞれ変化させて計算したトレーサー応答結果を利用した. Fig.5.4 および Fig.5.5 はそれぞれ γ , b について求めたトレーサー応答と, トレーサー応答から算出した無次元温度 T_p である. 双方の結果から, トレーサーの到達からやや遅れて温度の低下が始まることが確認できる. ここで, 次の式を利用して還元熱水の温度と初期岩体温度を利用して無次元温度 T_p から実際の温度履歴 T_R を求めた. Fig.5.4, Fig.5.5 を換算した結果は次の通りである.

$$T_R(t) = T_p(T_J - T_I) + T_I \tag{5.5}$$

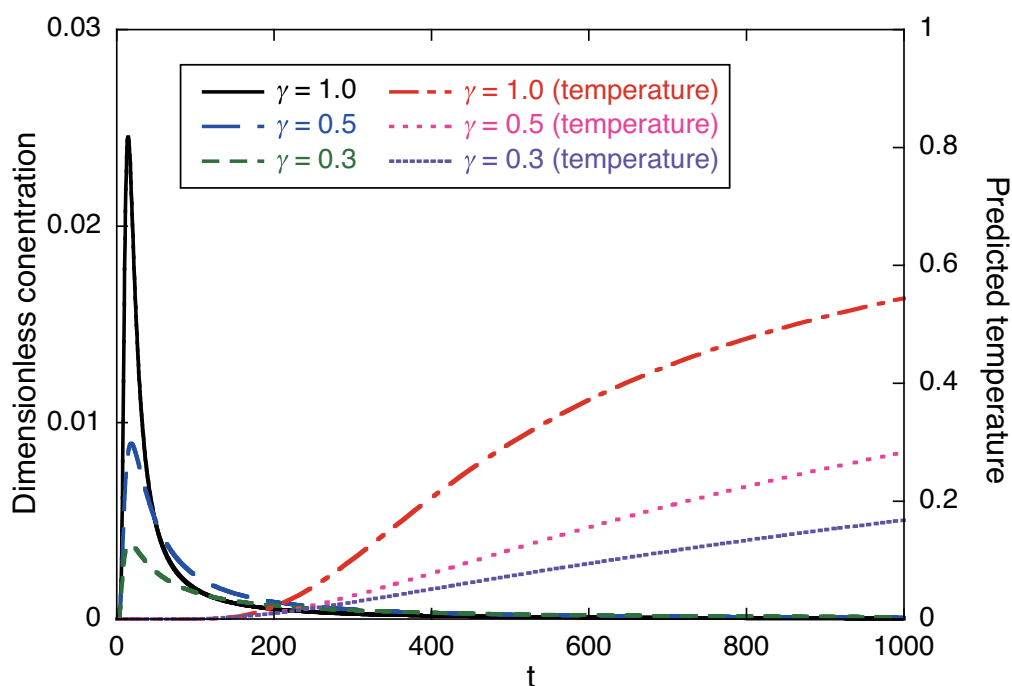


Fig. 5.4: トレーサー応答とそこから推定された温度変化 (時間微分項の微分係数 γ)

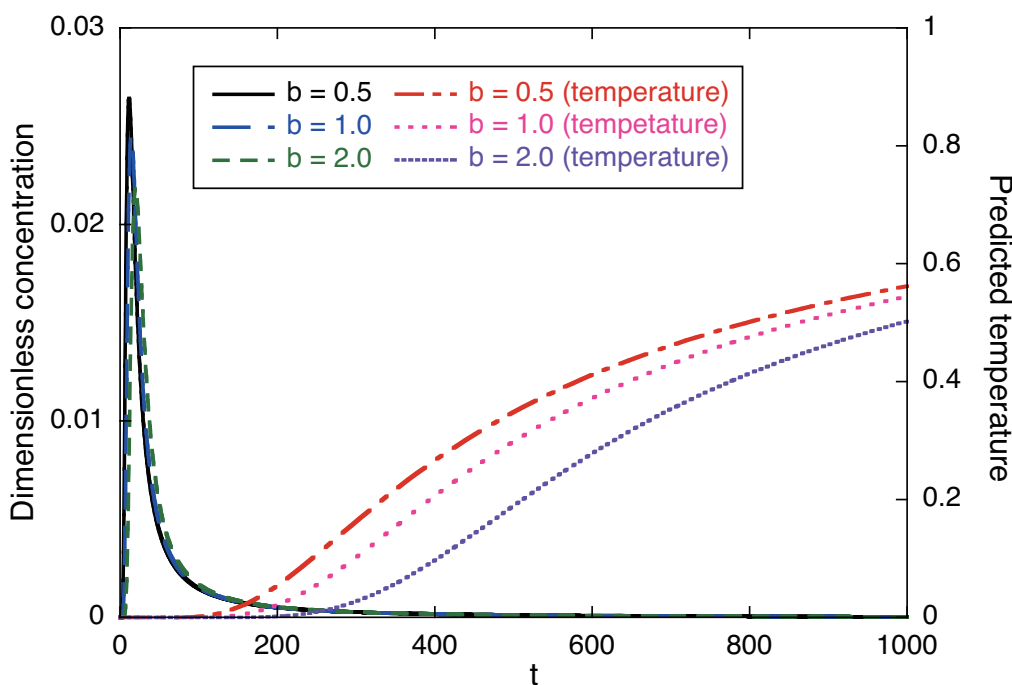


Fig. 5.5: トレーサー応答とそこから推定された温度変化 (微分係数でない変数 b)

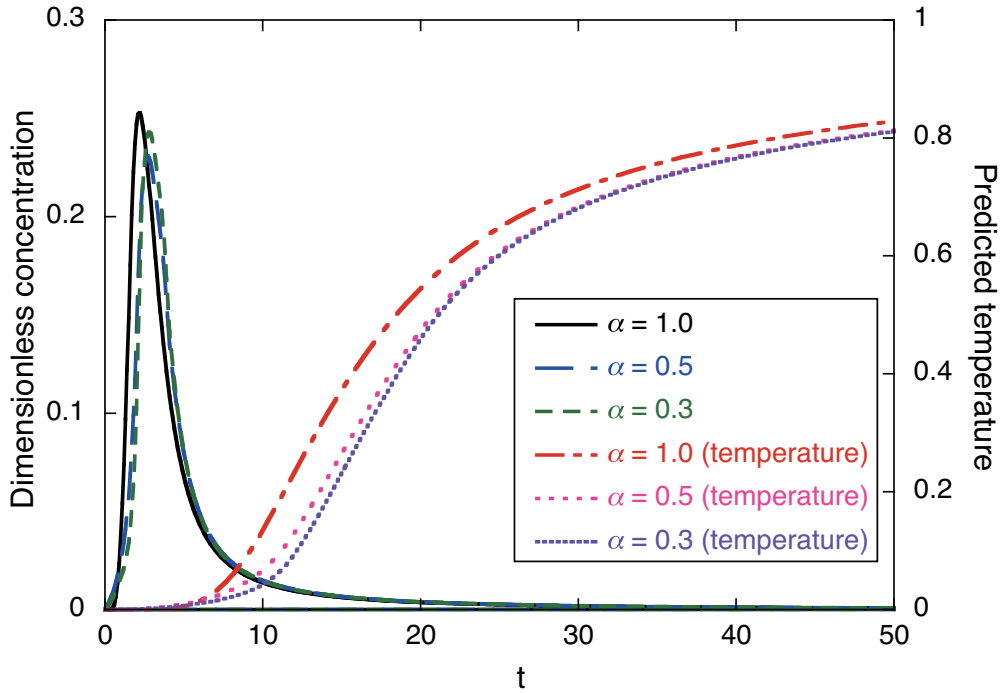


Fig. 5.6: トレーサー応答とそこから推定された温度変化（空間微分項の微分係数 α ）

$T_L[^\circ\text{C}]$ は還元熱水の温度， $T_I[^\circ\text{C}]$ は初期岩体温度である．Fig.5.7 より，時間微分項の微分係数 γ が小さくなると温度低下抑制効果が大きくなることが確認できる．これは， γ が物質輸送に及ぼす全体的な移動速度の抑制作用と調和的な結果であると考えられる．また，Fig.5.8 による結果と比較すると，時間微分項の値を直接制御する変数 b よりも熱移動に及ぼす γ の影響が顕著であることが確認できる．

前章までに提案した物質輸送数値モデルと，本章で提示した温度推定モデルから，既存地熱システムにおける適切な還元井設計を目的とした長期物質輸送および温度変化の推定手法の概念は Fig. 5.10 のようにまとめられる．

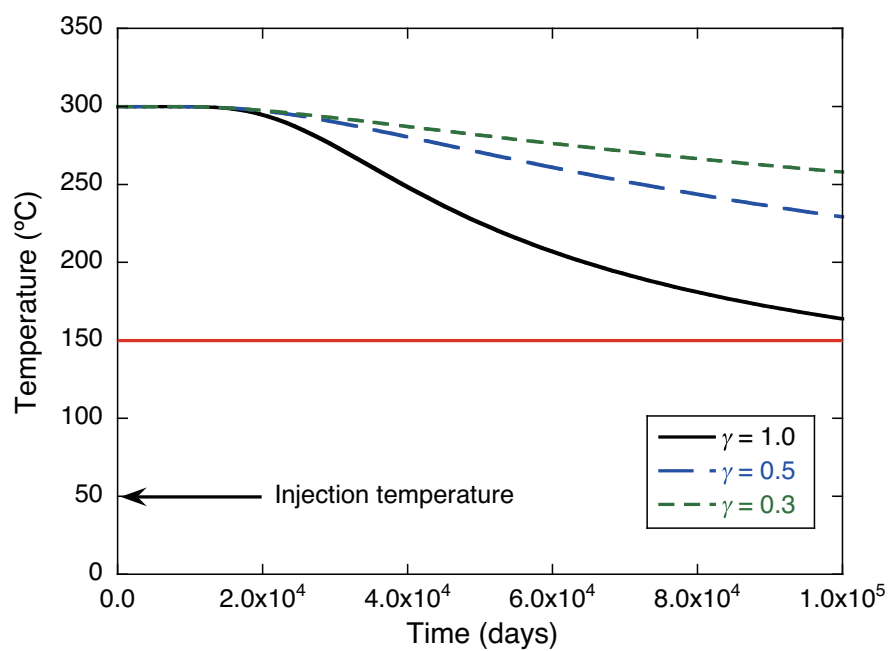


Fig. 5.7: 初期岩体温度と還元熱水温度を考慮した温度の低下挙動（時間微分項の微分係数 γ ）

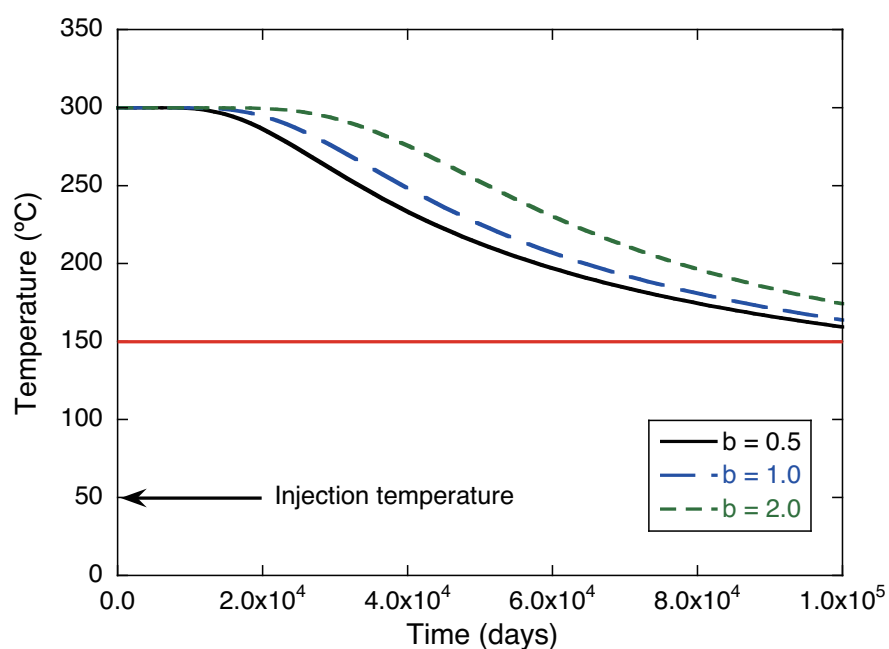


Fig. 5.8: 初期岩体温度と還元熱水温度を考慮した温度の低下挙動（微分係数でない変数 b ）

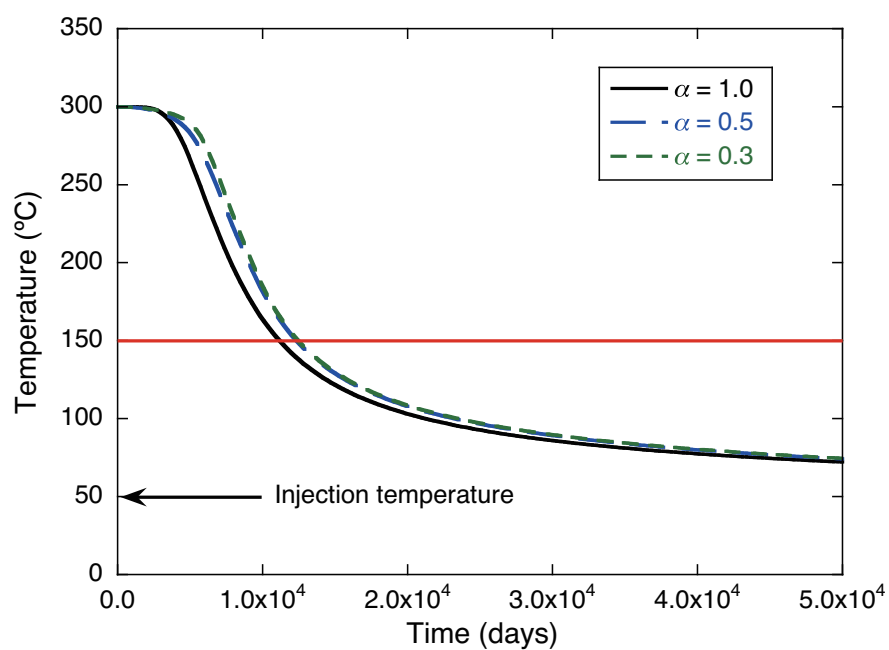


Fig. 5.9: 初期岩体温度と還元熱水温度を考慮した温度の低下挙動（空間微分項の微分係数 α ）

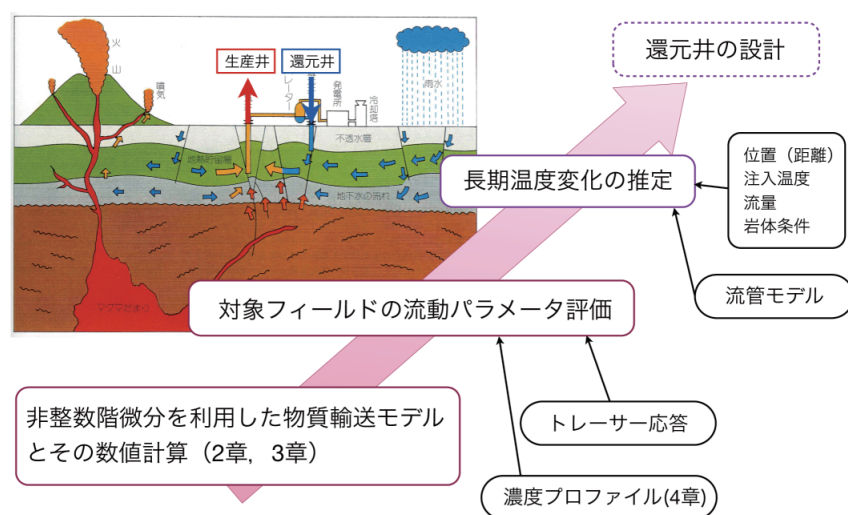


Fig. 5.10: 還元井設計の概念

5.3 結言

既存地熱システムにおいて、持続可能な地熱利用を行うためには、流体の還元による人工的な貯留層の涵養が必要不可欠である。本章では、適切な還元井設計を目的として、トレーサー試験解析から得られた複雑流動パラメータを活用した貯留層内部の長期物質輸送と温度変化挙動を推定する手法の概念を提示した。以下に得られた知見を述べる。

1. トレーサー試験解析から取得された複雑流動パラメータを利用して、長期にわたる物質輸送と温度変化の推定する手法を提示した。温度変化の推定には、熱と物質の移動速度が流体の移動速度に比べて十分に小さいと仮定した流管モデルを使用した。
2. 物質輸送数値モデルによって求められたトレーサー応答曲線から温度変化を計算することで、数値モデルに含まれる変数が温度変化に及ぼす影響を検討した。時間微分項に存在する微分係数が温度変化に及ぼす影響を計算したところ、微分係数の減少にともなって温度低下が大きく抑制されることが明らかとなった。これは、微分係数の減少にともなって物質輸送が抑えられることと調和的である。
3. 空間微分項の微分係数および時間微分項どうしの影響を制御する変数が温度変化に与える影響は、時間微分項の微分係数が変化した場合よりも小さい。

参考文献

- [1] Valgarur Stefánsson. Geothermal reinjection experience. *Geothermics*, Vol. 26, No. 1, pp. 99–139, 1997.
- [2] K.P. Goyal. Injection related cooling in the Unit 13 area of the Southeast Geysers, California, USA. *Geothermics*, Vol. 28, pp. 3–19, 1999.
- [3] G. Bødvarsson. Thermal problems in the siting of reinjection wells. *Geothermics*, Vol. 1, No. 2, pp. 63–66, 1972.
- [4] Gudmundur S. Bødvarsson and Chin Fu Tsang. Injection and thermal breakthrough in fractured geothermal reservoirs. *Journal of Geophysical Research*, Vol. 87, No. B2, pp. 1031–1048, February 1982.
- [5] R.N. Horne. Reservoir engineering aspects of reinjection. *Geothermics*, Vol. 14, No. 2/3, pp. 449–457, 1985.
- [6] 有木和春, 畠山和義. 還元能力に及ぼす還元熱水の温度の影響について. 日本地熱学会誌, Vol. 19, pp. 197–208, 1997.
- [7] Gudni Axelsson, Olafur G. Flovenz, Steinunn Hauksdottir, Arnar Hjartarson, and Jiurong Liu. Analysis of tracer test data, and injection-induced cooling, in the Laugaland geothermal field, N-Iceland. *Geothermics*, Vol. 30, pp. 697–725, 2001.
- [8] G. Michael Shook. Predicting thermal breakthrough in heterogeneous media from tracer tests. *Geothermics*, Vol. 30, pp. 573–589, 2001.
- [9] Jerzy Stopa and Paweł Wojnarowski. Analytical model of cold water front movement in a geothermal reservoir. *Geothermics*, Vol. 35, pp. 59–69, 2006.
- [10] 日本機械学会（編）. 日本機械学会蒸気表. 日本機械学会, 1980.

第6章 結論

地熱貯留層の人工的涵養を目的とした熱水の還元技術は地熱発電の持続可能な運用に必要な技術であり、放射性廃棄物の地層処分技術は安定した原子力発電を続けるためには回避できない問題である。これらは化石資源に乏しい我が国の特性を考慮した上でも、純国産エネルギーたる地熱やプルサーマルによって準国産ともされる原子力発電の安定した運用のために必要なものである。本論文では、これら複雑な地殻媒体を対象とした地殻利用技術への寄与を目的として、少ない変数で大域的な物質輸送と温度変化挙動を推定する概念を提案した。以下に、得られた知見を列挙する。

第2章では、複雑な地殻媒体における物質輸送解析を目的として、非整数階微分を利用した物質輸送数値モデルを提示した。また、数値モデルの数値計算手法として差分法を利用した数値シミュレーションプログラムを開発しその妥当性を確認した。

1. 複雑な地殻媒体を対象とした物質輸送の推定を目的として、非整数階微分を利用した移流拡散方程式による数値モデルを提案した。
2. 非整数階微分を含んだ移流拡散方程式の数値解法として、差分法を利用した数値計算コードを開発した。
3. 初期値問題を考慮した定義の選定と変数変換により、Caputo による非整数階微分を含む項は Riemann-Liouville の定義による項と同様に離散化が可能となった。
4. 開発した数値計算コードによる計算結果は、同一条件で得られた解析解とよく一致していることが確認された。

第2章にて提示した物質輸送数理モデルには複数の変数が含まれている。これらの変数が物質輸送に及ぼす影響を検討した。

1. 空間微分項の微分係数が変化した場合、濃度分布に見られるトレーサーの分布に変化が見られるようになる。
2. 時間微分項の微分係数が変化した場合、トレーサー応答でしばしば観測される長いテールが発生し始める。
3. 時間微分項同士の影響度合いに作用する係数は、値の増大とともに帯水層内部拡散の影響を大きくする。逆に小さくなる場合は周辺岩体への拡散度合いを強める作用を及ぼす。
4. ペクレ数 Pe は一般的な移流拡散方程式と同様に、移流と拡散の比率を示す無次元数である。空間微分項 α が含まれているため通常 Pe がとりうる値を示すとは限らないものの、その数値のもたらす結果は通常のペクレ数と変わらない。

第3章の結果から、物質輸送数理モデルに含まれる変数は一種類のみでも物質輸送に及ぼす影響が大きいことが示唆された。また、特定の物理量から変数を推定することは困難である。そこで第4章では、物質輸送数理モデルに含まれる変数の合理的な決定手法を提案した。

1. 数理モデルに含まれる複数の未決定変数の合理的な決定法として、非線形計画法を利用した変数決定法を提案した。2種類のトレーサー観測値から、変数の推定を行う。
2. 未決定変数を2種類とした解析では、初期値の組み合わせによらず決定された変数は目標値との差が十分に小さいものであった。
3. 未決定変数を3種類とした解析では、いずれの変数も目標値への収束性が低下した。そのため、収束性の良い変数を固定したうえで2未決定変数での解析を行うことで推定精度の向上が見込まれる。

4. 実際に観測されたトレーサー情報を使用して物質輸送数値モデルの変数推定を行ったところ、測定値を満足する計算結果となる変数を推定することができた。これにより、観測されたトレーサー濃度分布を利用して数値モデルの変数を推定することで、当該地域の物質輸送を推定することが可能であることが示唆された。

既存地熱システムにおいて、持続可能な地熱利用を行うためには、流体の還元による人工的な貯留層の涵養が必要不可欠である。第5章では、適切な還元井設計を目的として、トレーサー試験解析から得られた複雑流動パラメータを活用した貯留層内部の長期物質輸送と温度変化挙動を推定する手法の概念を提示した。以下に得られた知見を述べる。

1. トレーサー試験解析から取得された複雑流動パラメータを利用して、長期にわたる物質輸送と温度変化の推定する手法を提示した。温度変化の推定には、熱と物質の移動速度が流体の移動速度に比べて十分に小さいと仮定した流管モデルを使用した。
2. 物質輸送数値モデルによって求められたトレーサー応答曲線から温度変化を計算することで、数値モデルに含まれる変数が温度変化に及ぼす影響を検討した。時間微分項に存在する微分係数が温度変化に及ぼす影響を計算したところ、微分係数の減少にともなって温度低下が大きく抑制されることが明らかとなった。これは、微分係数の減少にともなって物質輸送が抑えられることと調和的である。
3. 空間微分項の微分係数および時間微分項どうしの影響を制御する変数が温度変化に与える影響は、時間微分項の微分係数が変化した場合よりも小さい。

付 録 A 流動パラメータと観測される物質移動

はじめに

第3章では第2章で提示した物質輸送数理モデルに含まれる変数が物質輸送に及ぼす影響を検討した。ここでは、第3章で行った全ての計算結果を記載する。

方程式と計算条件

次に示す移流拡散方程式を使用して数値計算を行った。第3章と同様に初期条件の異なる2種類の条件で計算し、トレーサの空間分布とトレーサの時間応答を観測した。

$$\frac{\partial C}{\partial t} + b \frac{\partial \gamma C}{\partial t \gamma} + \frac{\partial \beta C}{\partial t \beta} = - \frac{\partial C}{\partial X} + \frac{1}{Pe} \frac{\partial}{\partial X} \left(\frac{\partial \alpha C}{\partial X \alpha} \right) \quad (\text{A.1})$$

条件 1:

$$t = 0, C = 0,$$

$$X = 0, C = 1.0, \quad (\text{A.2})$$

$$X \rightarrow \infty, C \rightarrow 0.$$

条件 2:

$$\begin{aligned} t = 0, C = 0, \\ X = 0, C = C_0(t), \\ X \rightarrow \infty, C \rightarrow 0. \end{aligned} \tag{A.3}$$

使用した計算条件は Table.A.1 の通りである。挙動の検討を行う変数以外については Table.A.2 の値を使用した。

Table. A.1: 数理モデルの計算条件

変数	数値
距離: X	100
時間: t	100
距離の分割数: N_x	1000
時間の分割数: N_t	10000
トレーサー投入時間: t_{in}	1.0

Table. A.2: 変数を固定する場合の設定値

変数	数値
微分係数: α	1.0
微分係数: β	0.5
微分係数: γ	1.0
係数: b	1.0
ペクレ数: Pe	10

時間微分項に存在する微分係数1

式 (A.1) の左辺第 2 項に存在する微分係数 γ について数値計算を行った。

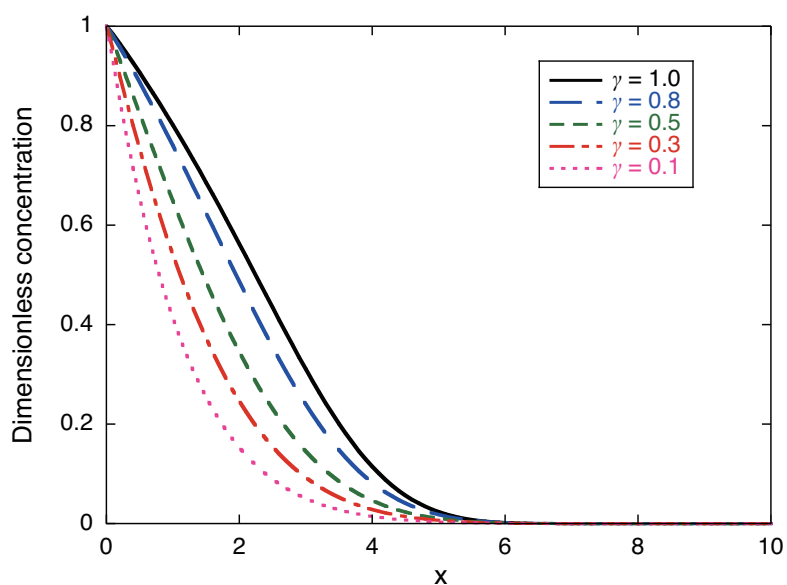


Fig. A.1: 濃度分布 (条件 1, $t = 10$)

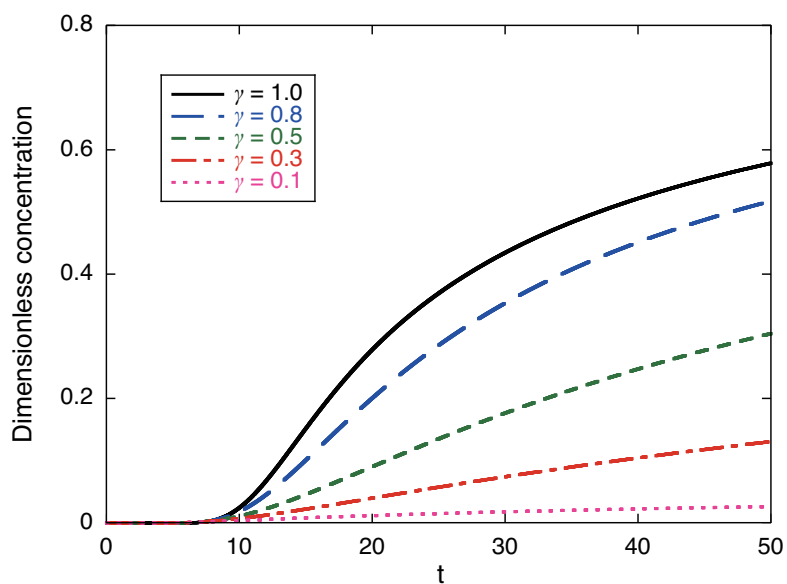


Fig. A.2: 応答曲線 (条件 1, $x = 5$)

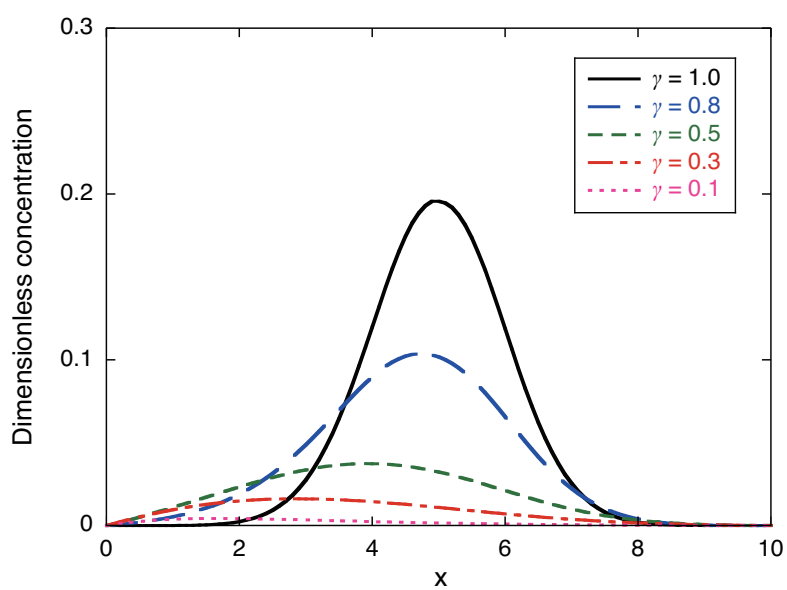


Fig. A.3: 濃度分布 (条件 2, $t = 10$)

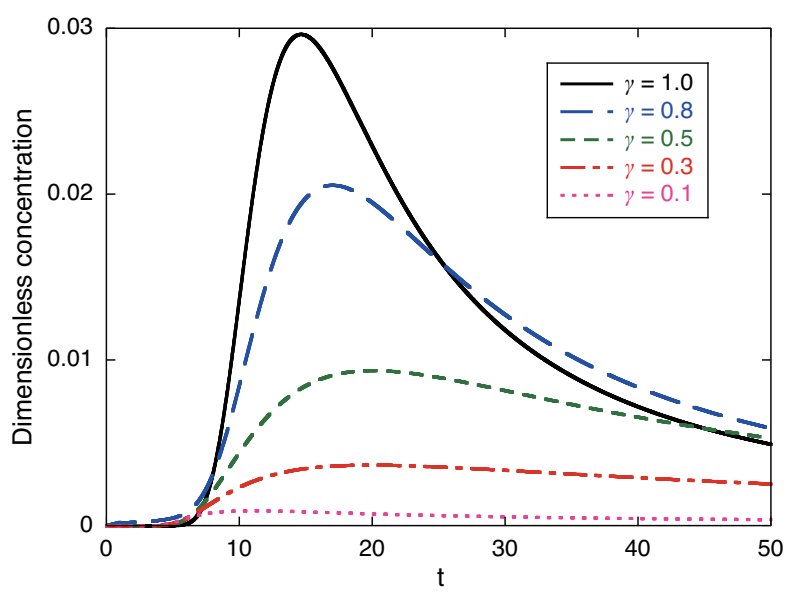


Fig. A.4: 応答曲線 (条件 2, $x = 5$)

時間微分項に存在する微分係数 2

式 (A.1) の左辺第 3 項に存在する微分係数 β について数値計算を行った.

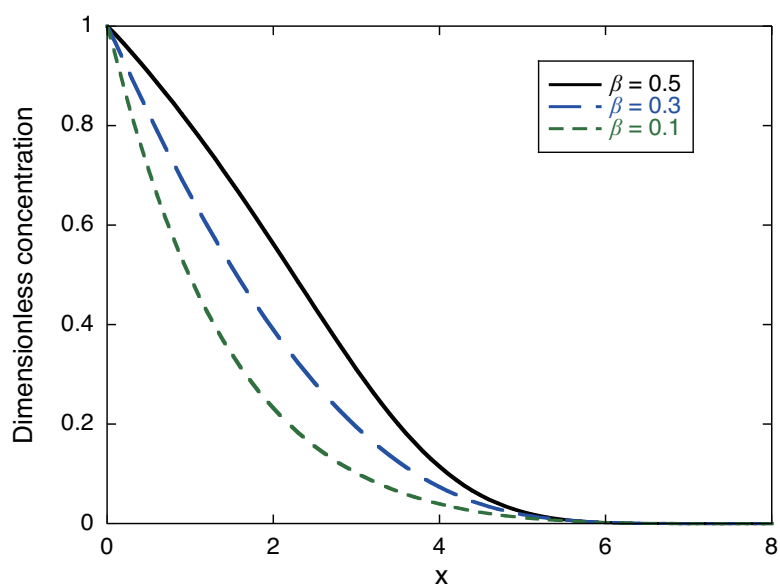


Fig. A.5: 濃度分布 (条件 1, $t = 10$)

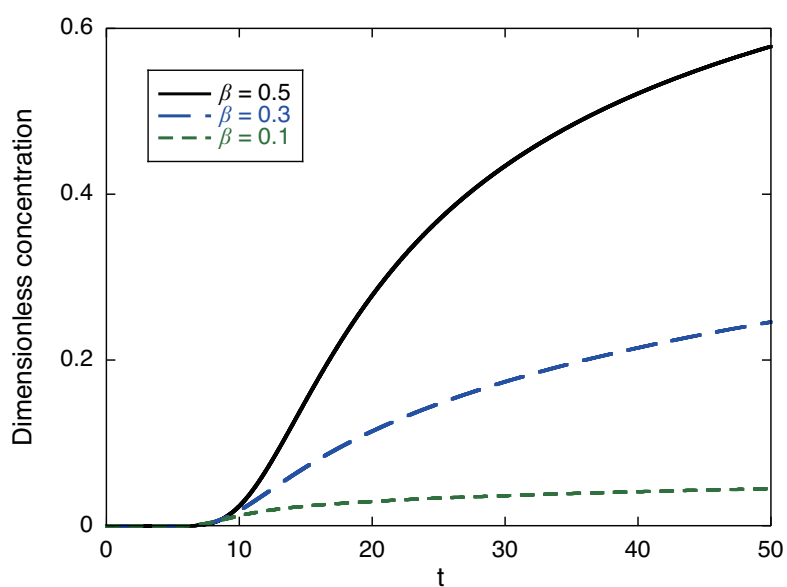


Fig. A.6: 応答曲線 (条件 1, $x = 5$)

付録A 流動パラメータと観測される物質移動

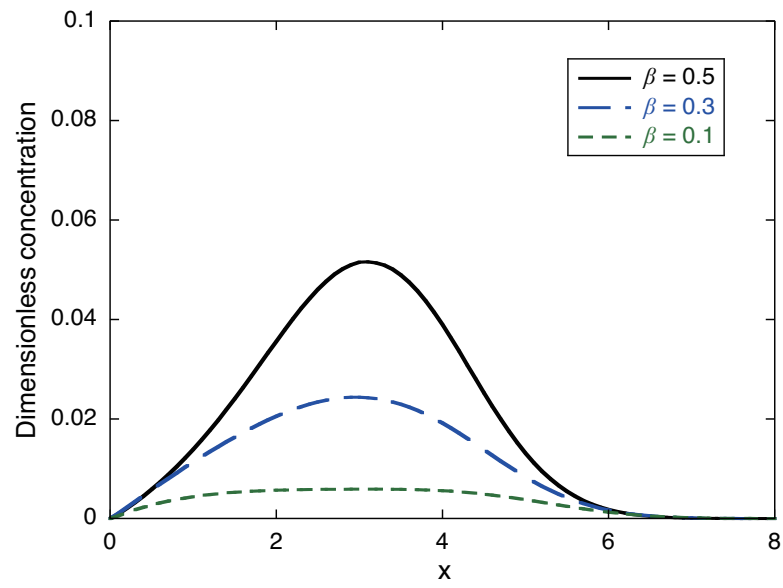


Fig. A.7: 濃度分布 (条件 2, $t = 10$)

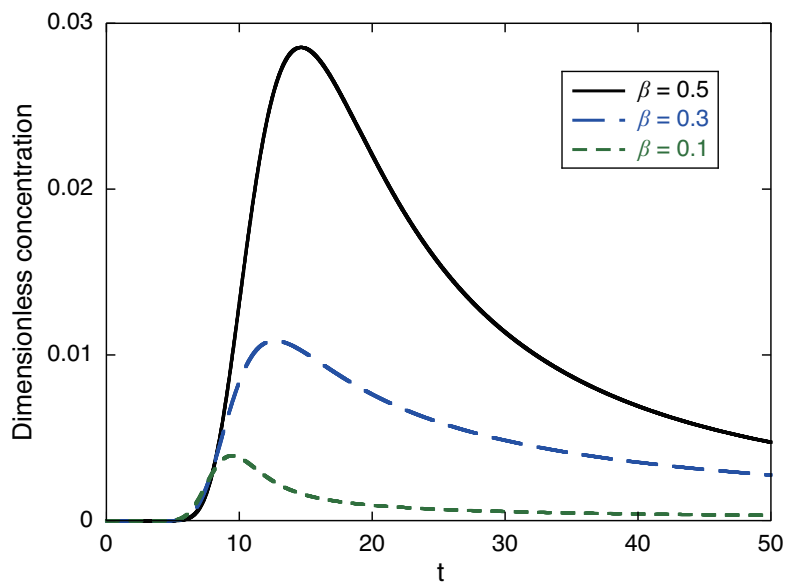


Fig. A.8: 応答曲線 (条件 2, $x = 5$)

空間微分項に存在する微分係数

式 (A.1) の右辺第 2 項に存在する微分係数 α について数値計算を行った.

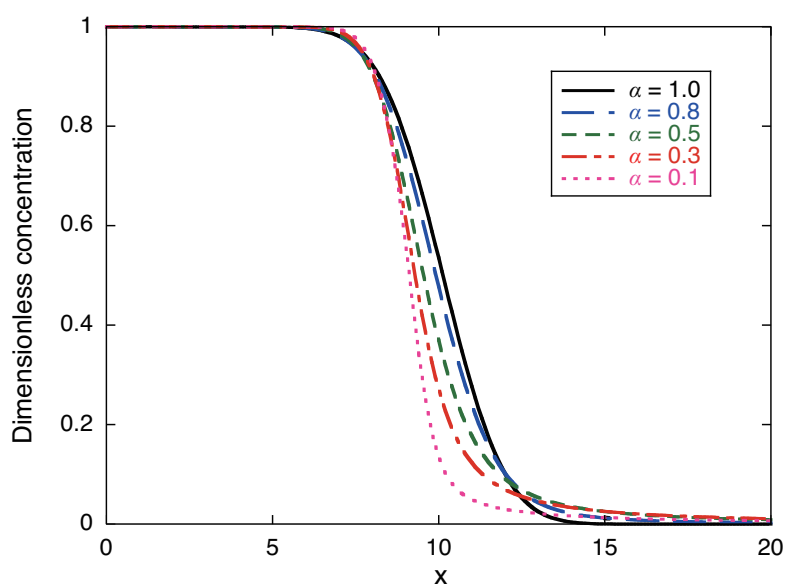


Fig. A.9: 濃度分布 (条件 1, $t = 10$)

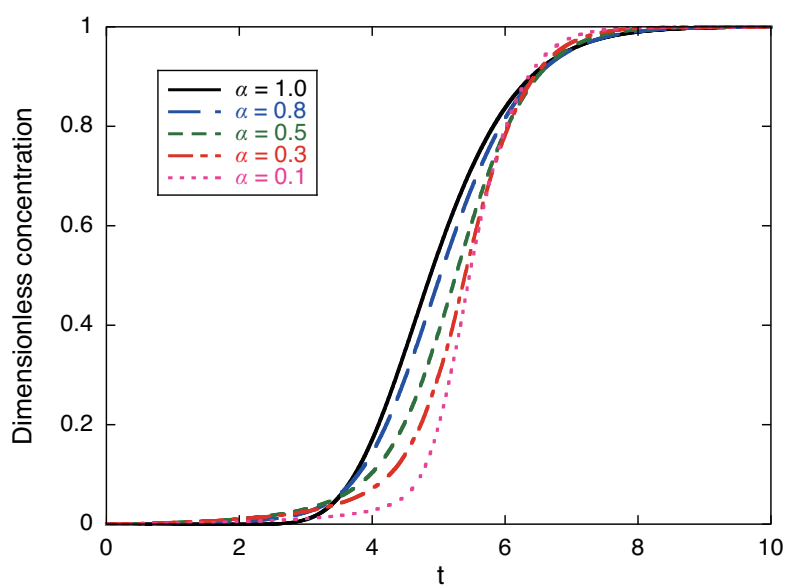


Fig. A.10: 応答曲線 (条件 1, $x = 5$)

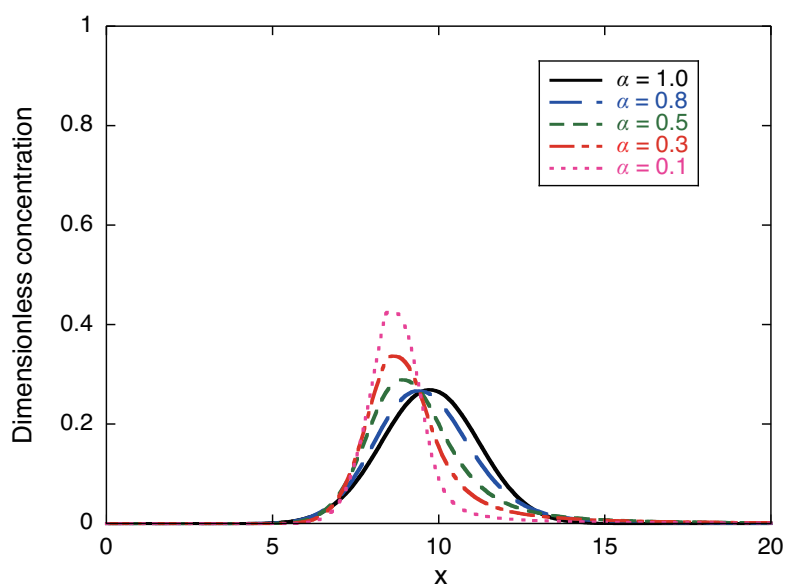


Fig. A.11: 濃度分布 (条件 2, $t = 10$)

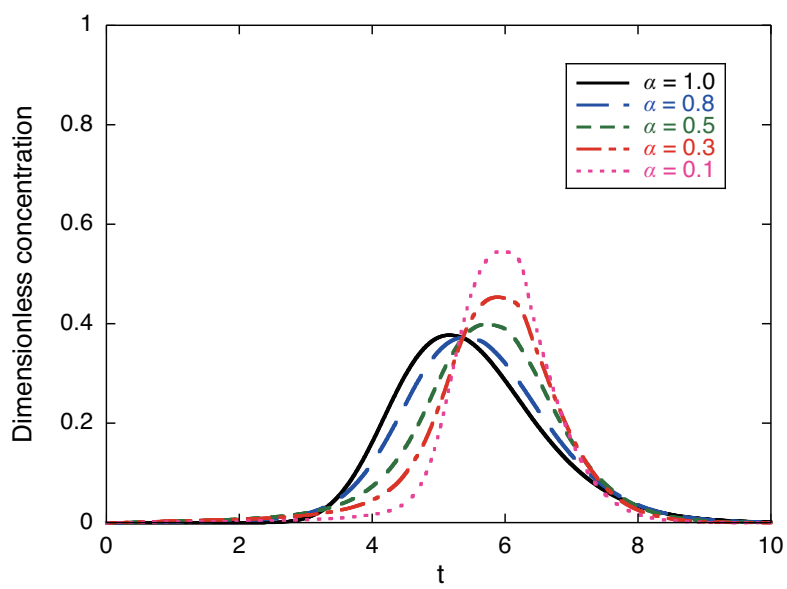


Fig. A.12: 応答曲線 (条件 2, $x = 5$)

微分係数以外の変数 1

式 (A.1) の左辺第 2 項に存在する係数 b について数値計算を行った.

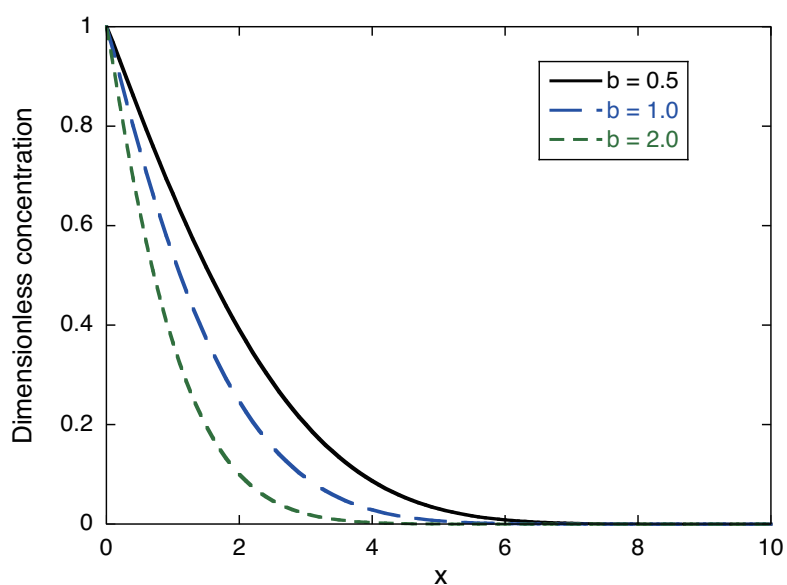


Fig. A.13: 濃度分布 (条件 1, $\beta > \gamma, t = 10$)

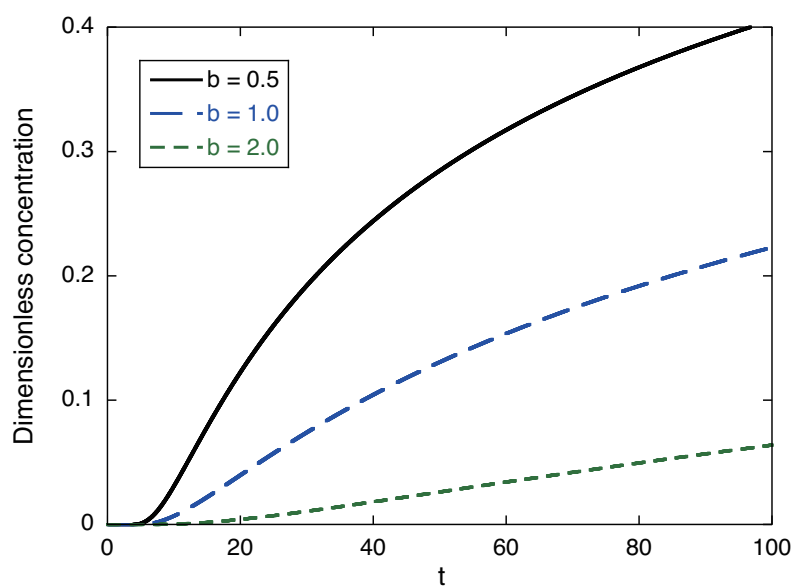


Fig. A.14: 応答曲線 (条件 1, $\beta > \gamma, x = 5$)

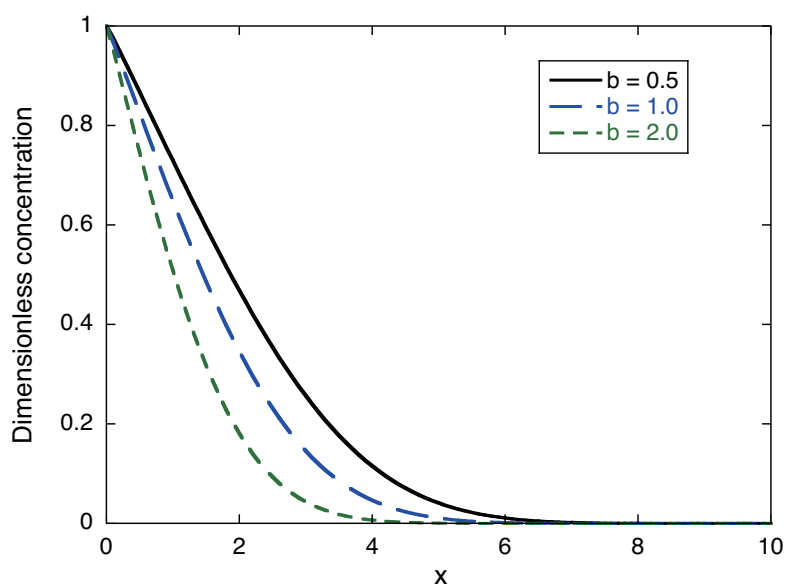


Fig. A.15: 濃度分布 (条件 1, $\beta = \gamma, t = 10$)

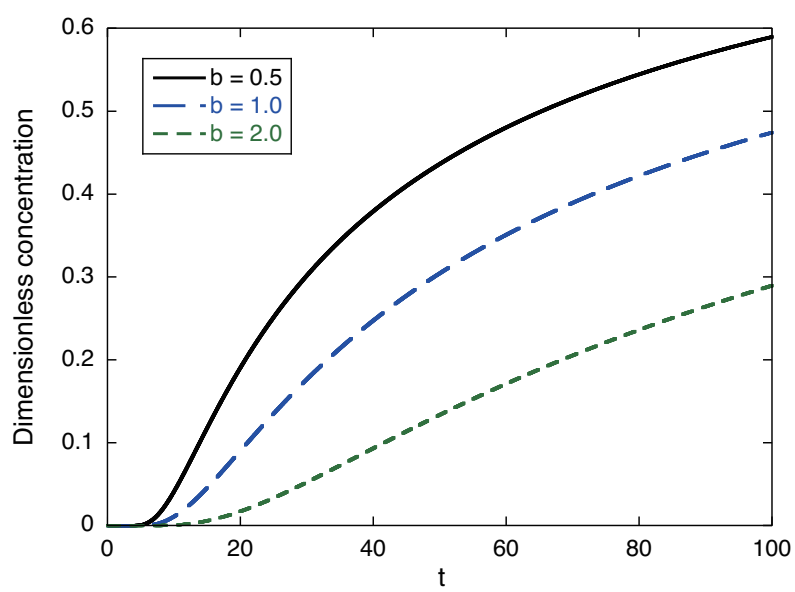


Fig. A.16: 応答曲線 (条件 1, $\beta = \gamma, x = 5$)

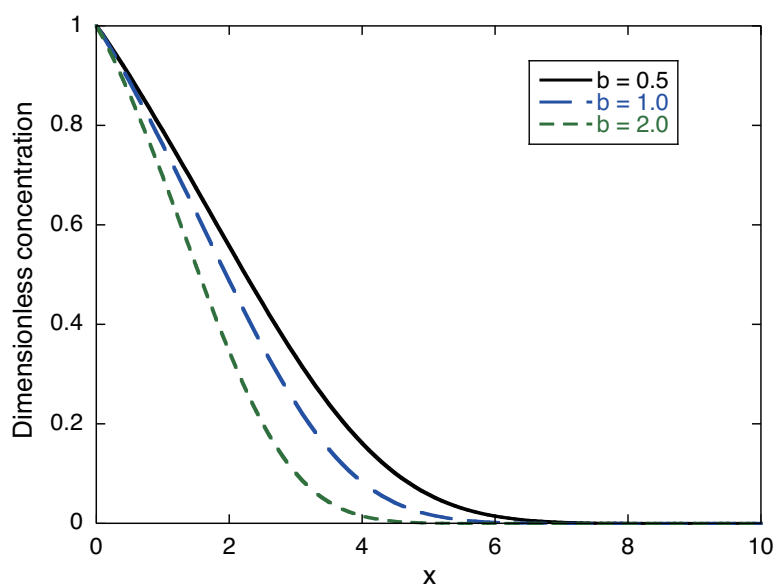


Fig. A.17: 濃度分布 (条件 1, $\beta < \gamma$, $t = 10$)

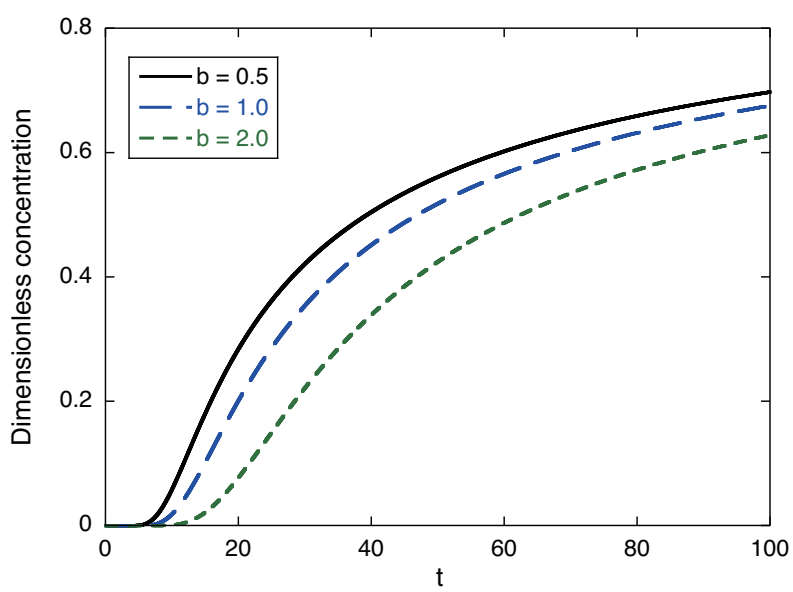


Fig. A.18: 応答曲線 (条件 1, $\beta < \gamma$, $x = 5$)

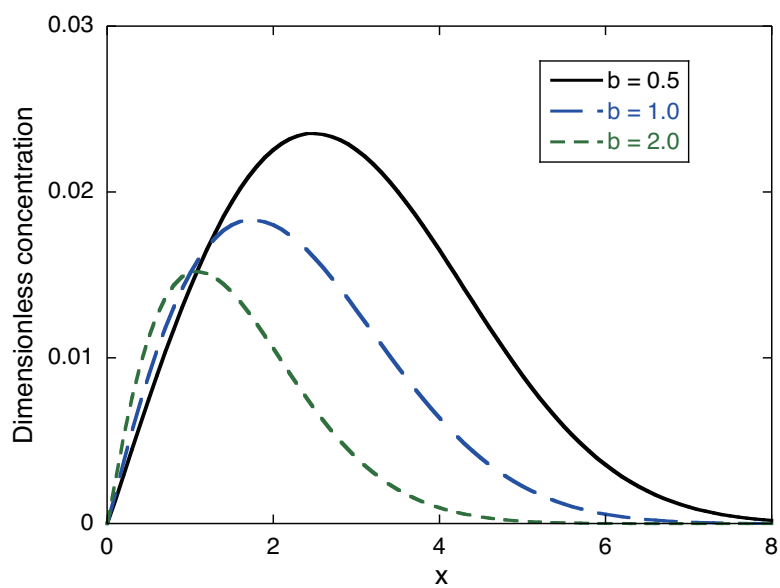


Fig. A.19: 濃度分布 (条件 2, $\beta > \gamma$, $t = 10$)

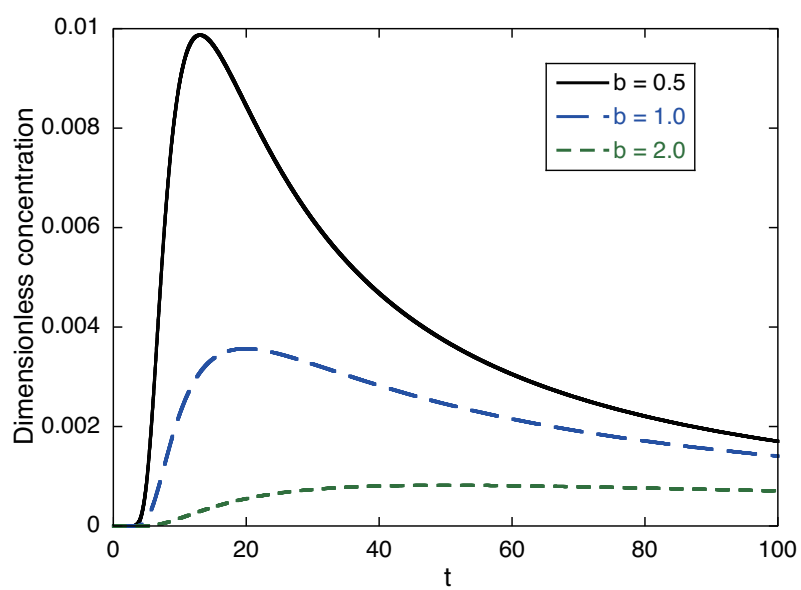


Fig. A.20: 応答曲線 (条件 2, $\beta > \gamma$, $x = 5$)

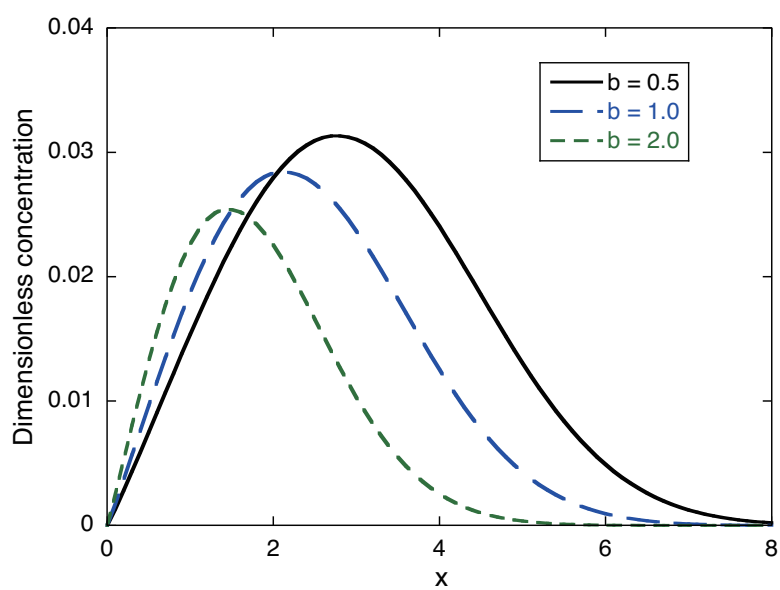


Fig. A.21: 濃度分布 (条件 2, $\beta = \gamma, t = 10$)

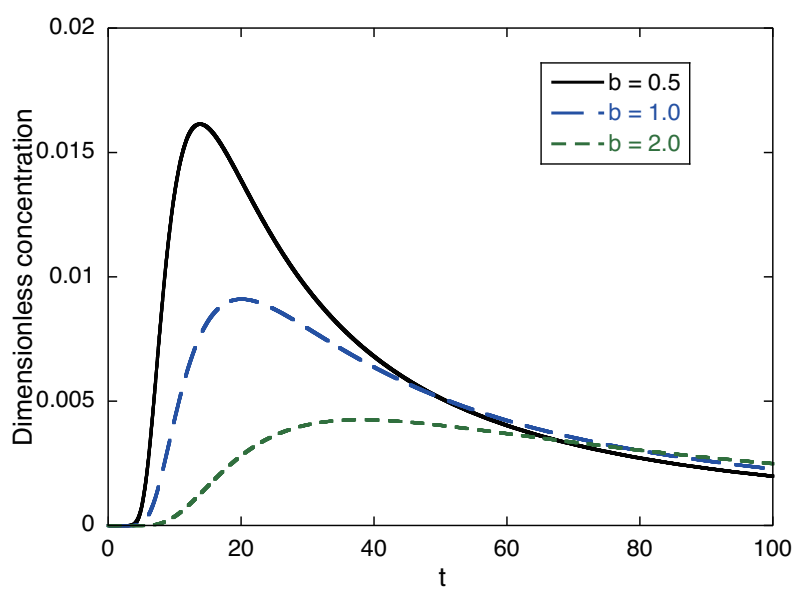


Fig. A.22: 応答曲線 (条件 2, $\beta = \gamma, x = 5$)

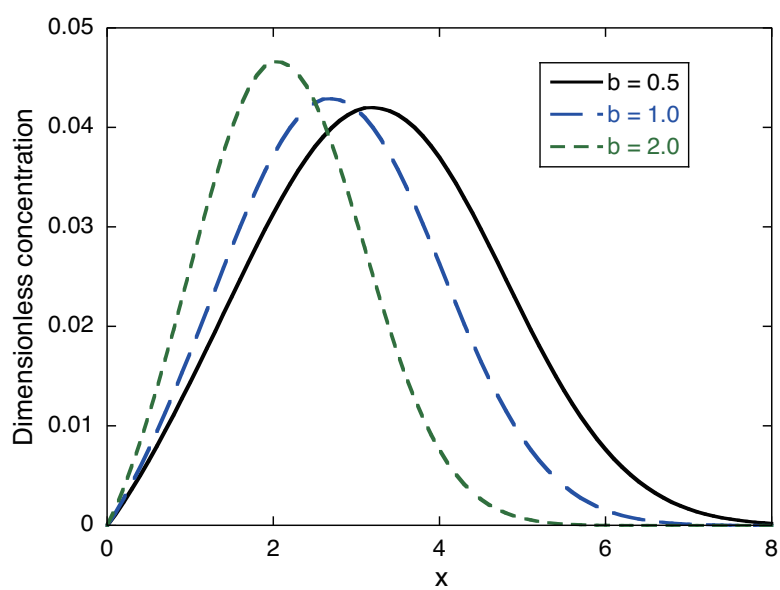


Fig. A.23: 濃度分布 (条件 2, $\beta < \gamma$, $t = 10$)

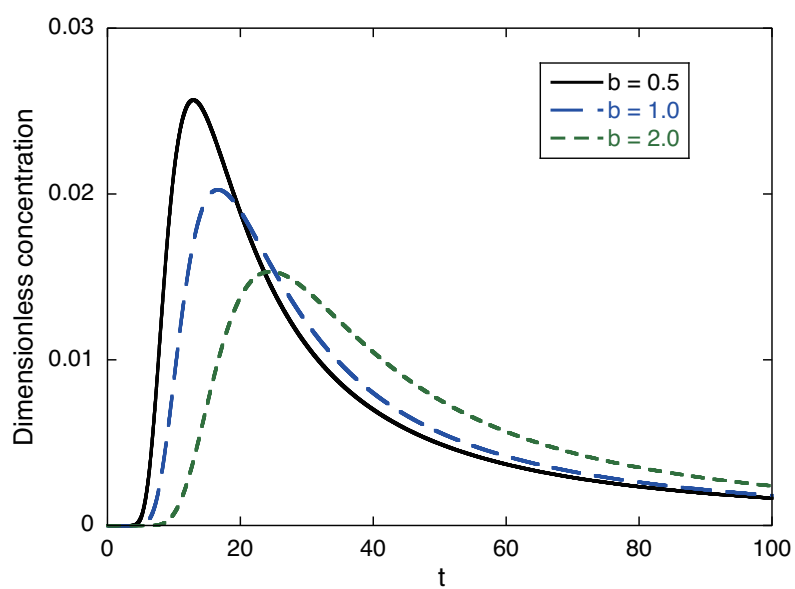


Fig. A.24: 応答曲線 (条件 2, $\beta < \gamma$, $x = 5$)

微分係数以外の変数 2

式 (A.1) の右辺第 1 項に存在する係数 Pe について数値計算を行った.

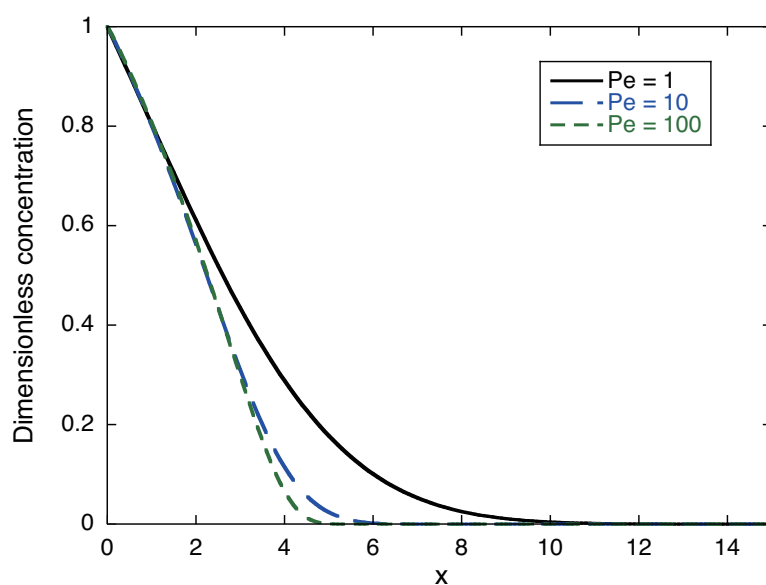


Fig. A.25: 濃度分布 (条件 1, $t = 10$)

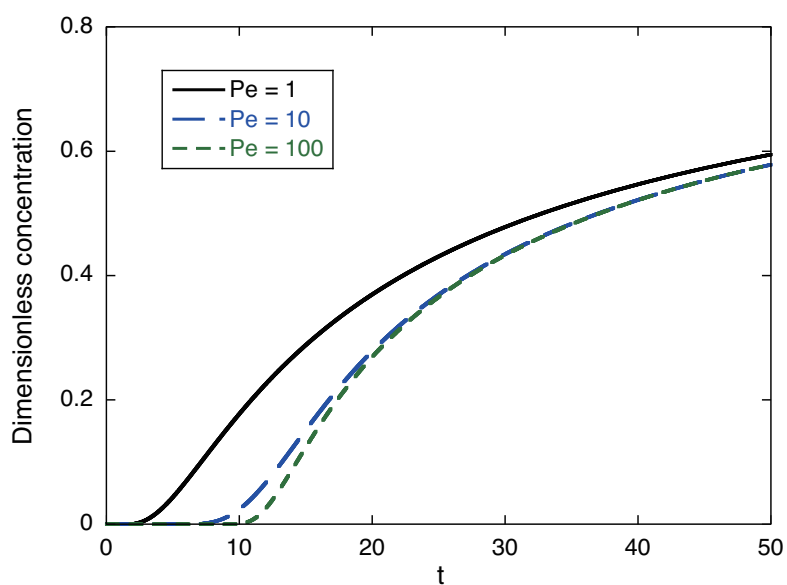


Fig. A.26: 応答曲線 (条件 1, $x = 5$)

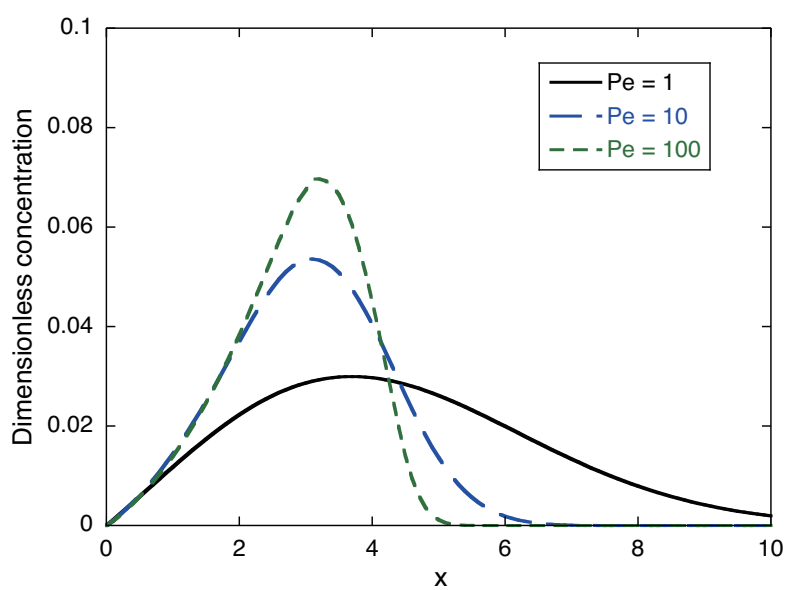


Fig. A.27: 濃度分布 (条件 2, $t = 10$)

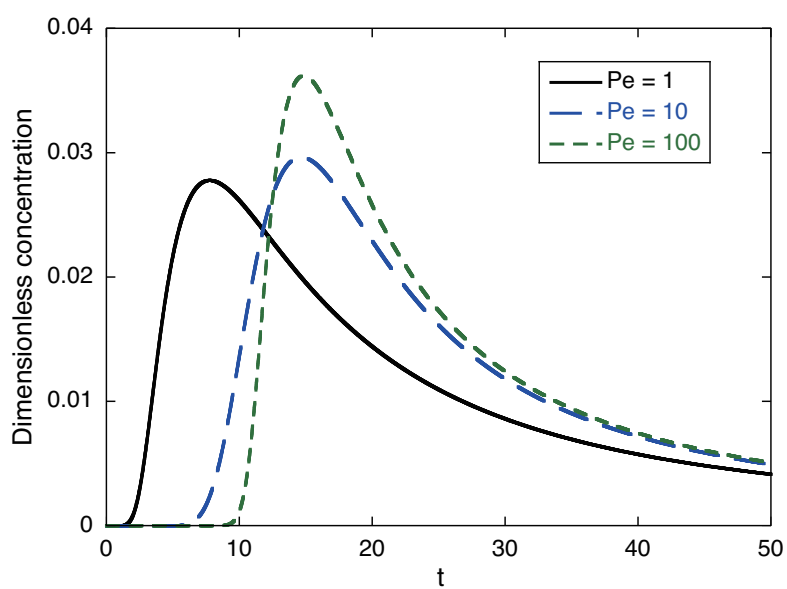


Fig. A.28: 応答曲線 (条件 2, $x = 5$)

謝辞

本研究を遂行するにあたり，終始懇切丁寧な御指導および御鞭撻を賜りました指導教員 橋田俊之教授に心から感謝の意を表します。

本論文をまとめるにあたり，貴重な御指導お呼び御教示を頂きました流体科学研究所 林一夫教授，工学研究科量子エネルギー工学専攻 新堀雄一准教授に深く感謝の意を表します。

California State University, Chico, Professor Sergei Fomin, Kazan State University, Professor Vladimir Chugunov のお二方には博士課程前期の頃より研究の基幹部分である非整数階微分を利用した数理モデルに関して懇切丁寧な御指導を賜りました。心より感謝の意を表します。

工学研究科 航空宇宙工学専攻 福永久雄教授には貴重なご意見ならびにご協力をいただきました。心より御礼申し上げます。エネルギー安全科学国際研究センター 三浦英生教授，庄子哲雄教授，大地昭生教授，久保百司教授，野中勇教授には貴重な御助言を頂きました。深く感謝の意を表します。

本研究を遂行する上で貴重なご意見・ご指導を賜りました多元物質科学研究所 佐藤一永助教，流体科学研究所 山本剛研究員，エネルギー安全科学国際研究センター 藤井孝志研究員，丁常勝研究員に深く感謝いたします。

本研究を遂行するにあたり貴重なご意見・ご協力をいただきました環境科学研究科 博士課程前期 大風崇君，鈴木杏奈さんに深く感謝いたします。

本論文を作成するにあたり多大なるご協力をいただきました，武山陽平君，陳韻吉君，中川智未さん，白須圭一君，鋤納伸治君をはじめとする橋田研究室の皆様に深く感謝いた

します。

エネルギー安全科学国際研究センター 大友智恵さん，鈴木南枝さんには研究生生活を送るにあたり多大なるご支援をいただきました，心より感謝の意を表します。

日本学術振興会および文部科学省 21 世紀 COE プログラム「流動ダイナミクス国際研究教育拠点」から多大なるご支援をいただきました，厚く御礼申し上げます。

最後に，長年にわたる学生生活を精神的，経済的にささえてくださった家族に，心から感謝の意を表します。

平成 22 年 1 月 20 日

公表論文リスト

学術論文（査読つき）

- R. Chiba, T. Okaze, S. Fomin, V. Chugunov, Y. Niibori, H. Fukunaga and T. Hashida, Numerical Simulations of the Anomalous Solute Transport in a Fractured Porous Aquifer, GRC Transactions, Vol.32, pp.431-443, 2008.
- M. Shirai, R. Chiba, S. Fomin, V. Chugunov, T. Takahashi, Y. Niibori and T. Hashida, Numerical Model of Fluid Flow through Heterogeneous Rock for High Level Radioactive Waste Disposal, AIP Conference Proceedings, Vol.898, pp.57-62, 2007.
- R. Chiba, S. Fomin, V. Chugunov, Y. Niibori and T. Hashida, Numerical Simulation of Non-Fickian Diffusion and Advection in a Fractured Porous Aquifer, AIP Conference Proceedings, Vol.898, pp.75-78, 2007.

参考論文（国際会議プロシーディング）

- R. Chiba, Y. Takashima, T. Takahashi, T. Ito, K. Hayashi and T. Hashida, Effects of Thermal Stresses on Rock Permeability with application to the Thermal Extraction from Supercritical Rock Masses, RENEWABLE ENERGY 2006 Proceedings, pp.1575-1577, 2006.
- R. Chiba, S. Fomin, V. Chugunov, Y. Niibori and T. Hashida, Numerical Solution of

Fractional Advection-Dispersion Equation for non-Fickian Diffusion in Fractional Porous Aquifer, RENEWABLE ENERGY 2006 Proceedings, pp.1613-1616, 2006.

- R. Chiba, S. Fomin, V. Chugunov, Y. Niibori and T. Hashida, Numerical Solutions of the Anomalous Contaminant Transport in a Fractured Porous Aquifer, 8th JAPAN-KOREA STUDENT' S SYMPOSIUM, pp.125-128, 2007.
- T. Hashida, R. Chiba and S. Fomin, Modeling of Fluid Flow in Complex Fracture Systems for Sustainable Subsurface Utilization, 1st International Symposium on Aqua Science, Water Resource and Innovation Development of Countryside, pp.97-102, 2007.
- R. Chiba, S. Fomin, V. Chugunov, Y. Niibori and T. Hashida, Numerical Solutions of the Anomalous Contaminant Transport in a Heterogeneous Aquifer, 1st International Symposium on Aqua Science, Water Resource and Innovation Development of Countryside, pp.349-352, 2007.

書籍

- S. Maruyama, J. Mizusaki, K. Yashiro, K. Maruta, H. Kobayashi, Y. Ogami, H. Asanuma, H. Niitsuma, T. Ito, K. Yamamoto, R. Aoyagi, T. Suekane, K. Akaku, T. Hashida, R. Chiba and S. Fomin, Nano-Mega Scale Flow Dynamics in Energy Systems, Tohoku University Press, Sendai, Japan, February 2008.

口頭発表（ポスター含む）

- R. Chiba, S. Fomin, V. Chugunov, Y. Niibori and T. Hashida, Numerical Solution of Fractional Advection-Dispersion Equation for Fractured Porous Aquifer, Joint Meeting

of Eight International Symposium on Hydrothermal Reactions & Seventh International Conference on Solvothermal Reactions(ISHR&ICSTR2006), Sendai, 2006.

- R. Chiba, Y. Takashima, T. Takahashi, T. Ito, K. Hayashi and T. Hashida, Effects of Thermal Stresses on Rock Permeability with application to the Thermal Extraction from Supercritical Rock Masses, RENEWABLE ENERGY 2006, Chiba, 2006.
- R. Chiba, S. Fomin, V. Chugunov, Y. Niibori and T. Hashida, Numerical Solution of Fractional Advection-Dispersion Equation for non-Fickian Diffusion in Fractional Porous Aquifer, RENEWABLE ENERGY 2006, Chiba, 2006.
- R. Chiba, S. Fomin, V. Chugunov, Y. Niibori and T. Hashida, Numerical Simulation of Non-Fickian Diffusion and Advection in a Fractured Porous Aquifer, 4th International Workshop on WATER DYNAMICS, Sendai, 2006.
- R. Chiba, S. Fomin, V. Chugunov, Y. Niibori and T. Hashida, Numerical solution of fractional advection-dispersion equation into fractured porous aquifer, 5th Joint ASME/JSME Fluids Engineering Conference, San Diego, 2007.
- R. Chiba, S. Fomin, V. Chugunov, Y. Niibori and T. Hashida, Non-Fickian Contaminant Transport in the Fractured Porous Aquifer, 5th International Workshop on WATER DYNAMICS, Sendai, 2007.
- R. Chiba, S. Fomin, V. Chugunov, Y. Niibori and T. Hashida, Numerical Solutions of the Anomalous Contaminant Transport in a Fractured Porous Aquifer, 8th JAPAN-KOREA STUDENT'S SYMPOSIUM, Sendai, 2007.
- R. Chiba, S. Fomin, V. Chugunov, Y. Niibori and T. Hashida, Numerical Solutions of the Anomalous Contaminant Transport in a Heterogeneous Aquifer, 1st International Sym-

posium on Aqua Science, Water Resource and Innovation Development of Countryside, Sakawa, 2007.

- R. Chiba, T. Okaze, S. Fomin, V. Chugunov, Y. Niibori, H. Fukunaga and T. Hashida, Numerical Simulations of the Anomalous Solute Transport in a Fractured Porous Aquifer, Geothermal Resources Council 2008 Annual Meeting, Reno, 2008.
- 千葉隆一, S. Fomin, V. Chugunov, 新堀雄一, 橋田俊之, 非整数階微分を利用した地殻内流動のモデル化に関する基礎的研究, 日本機械学会東北支部 第42期総会・講演会, 仙台, 2007.
- 千葉隆一, 大風崇, 鈴木杏奈, S. Fomin, V. Chugunov, 新堀雄一, 橋田俊之, 非整数階微分を利用した地殻内流体移動の数値シミュレーション法開発, 資源・素材学会東北支部 春季大会, 仙台, 2008.
- 千葉隆一, 大風崇, S. Fomin, V. Chugunov, 福永久雄, 新堀雄一, 橋田俊之, 非整数階微分を利用した地殻内物質輸送モデルの数値シミュレーション, 日本地熱学会平成20年学術講演会, 金沢, 2008.

受賞

- GRC Best Student Paper Award, GRC 2008 Annual Meeting, Reno, 2008.